



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

*Université Ibn Khaldoun - Tiaret  
Faculté des sciences de la matière  
Annexe Sougueur*

# PHYSIQUE DES SEMI-CONDUCTEURS

*- Polycopié de Cours -*



Dr. KHARROUBI Abdelmalek

## AVANT PROPOS

Ce polycopié de cours s'adresse aux étudiants de la 1<sup>ère</sup> année spécialité physique énergétique et énergies renouvelables, il comporte six chapitres.

Dans le premier chapitre, nous avons exposé les fondements nécessaires à la compréhension des notions sur la physique de solide, puis dans le deuxième chapitre ; nous avons rappelé les états électroniques du semi-conducteur ; en plus le troisième chapitre traite le statistique des semi-conducteurs homogènes.

Nous avons décrit dans le quatrième chapitre le semiconducteur à l'équilibre thermodynamique. Le phénomène de transport est présenté dans le cinquième chapitre

Enfin, nous avons présenté dans le derniers chapitre une synthèse sur la jonction pn.

Le cours permettra à l'étudiant de cerner le contexte scientifique, technologique et d'une situation complexe.

Le cours permettra à l'étudiant de faire preuve d'esprit critique et de rigueur scientifique dans l'analyse d'une situation complexe.

Le cours entrainera l'étudiant à tirer parti de la digitalisation des données lorsqu'il est confronté à une situation complexe adaptabilité

Le cours incitera l'étudiant à faire preuve de curiosité et d'une rigueur scientifique de niveau universitaire tant au fil de ses études que dans ses pratiques professionnelles.

## *Table des matières*

Chapitre 01 : A- Semi-conducteurs cristallins.....	7
I. Structure de l'état solide .....	8
I.1 Familles de solides cristallins .....	8
I.1.1 Structure cristalline : .....	8
I.1.2 Réseau cristallins.....	9
I.1.3. Plans réticulaires .....	13
I.1.4 structure du diamant.....	15
I.1.4.1 Semi-conducteurs de la colonne IV (Ge, Si) – Réseau diamant .....	15
I.1.5 Réseau réciproque .....	16
I.1.6 Zone de Brillouin .....	18
I.1.7. Densité d'états dans l'espace réciproque.....	19
Chapitre II : Etats électroniques du semi-conducteur.....	20
II.1. Des orbitales atomiques à la structure de bandes.....	21
II.1.1 Orbitales atomiques .....	21
II.1.2. Orbitales moléculaires .....	23
II.1.3 La molécule de carbone .....	25
II.1.4- Cas du solide : Conducteur - Isolant – Semiconducteur.....	26
II.2.5. Calcul de la structure de bandes d'énergie .....	32
II.2.5.1. Approximations de base.....	32
II.2.5.1.a. Approximation de Born-Oppenheimer .....	32
II.2.5.1.b. Méthode LCAO .....	33
II.2.5.1.c. Méthode OPW.....	33
II.2.5.1. d. Méthode du pseudopotentiel .....	34
II.2.6 Semiconducteurs univallée et multivallée .....	37
II.2 Notion de trou .....	41
II.2 .1 Concept de masse effective.....	42
II.2.1.1. Masse effective des trous .....	46
Chapitre III : Statistique des semi-conducteurs homogènes.....	49
III.1 Fonction de probabilité de Fermi – Dirac.....	50
III.2 Fonction de distribution et l'énergie de Fermi .....	53
Chapitre IV :. Semiconducteur à l'équilibre thermodynamique .....	57
IV.1 Distribution d'équilibre des électrons et des trous.....	58
IV.1.1 Les équations $n_0$ et $p_0$ .....	61
IV.1.1.1 Concentration d'électrons à l'équilibre thermodynamique .....	61
IV.1.1.2 Concentration du trou à l'équilibre thermodynamique : .....	63

IV.1.2 Densité d'états dans les bandes permises.....	64
IV 1.2.1. Bande de conduction .....	65
IV.1.2.2. Bande de valence.....	67
IV 1.2.3 Concentration intrinsèque des porteurs .....	67
IV1.2.4 La position intrinsèque au niveau de Fermi .....	68
IV.2 Semiconducteur extrinsèque à la température ambiante .....	70
IV.2.1 Dopage .....	70
IV.2.1.1 Semiconducteur de type n .....	70
IV.2.1.2 Semiconducteur de type p .....	71
IV.2.2 Définition et localisation des niveaux énergétiques de donneurs ( <b>Ed</b> ) et accepteurs ( <b>Ea</b> ) ...	72
IV.2.2.1. Niveau donneur .....	72
IV.2.2.2 Niveau accepteur .....	73
IV.2.3 Densité de porteurs et niveau de Fermi .....	74
IV.2.3.1 Semiconducteur compensé - Semi-Isolant .....	74
IV.2.3.2. Semi-conducteurs de type n .....	75
IV.2.3.3. Semi-conducteurs de type p .....	76
IV.2.4.1. Evolution du niveau de Fermi $E_{FN}(T)$ en fonction de la température.....	78
a. Niveau de Fermi .....	79
IV.2.4.2. Evolution des densités d'électrons et de trous en fonction de la température :.....	81
Chapitre V : Semiconducteur hors équilibre .....	84
V.1. Densité du courant de dérive .....	85
V.1.2 Effets sur la mobilité .....	87
V.1.3 Conductivité des électrons et les trous .....	89
V.1.4 Loi d'Ohm.....	90
V.1.5 Le courant de diffusion.....	91
V.2 Phénomène de Génération-Recombinaison.....	93
V. 2.1. Recombinaison directe (électron – trou).....	94
V. 2.2 Recombinaison indirecte (centre de recombinaison).....	96
V.2.2.1 Semiconducteur de type n.....	98
V.2.2.2 Semi-conducteur de type p .....	99
V.2.2.3 Zone de déplétion (dépeuplée) .....	99
V.2.2.4 Retour à l'équilibre d'un matériau excité .....	99
V.3. Équations d'évolution .....	100
V.3.1 Équations de continuité .....	100
V.3.2 Longueur de diffusion .....	101
Chapitre VI. : Jonction PN .....	103

VI.1 Jonction P-N abrupte à l'équilibre thermodynamique .....	104
VI.1.1. Charge d'espace.....	106
VI.1.2 Potentiel et champ électriques dans la zone de charge d'espace .....	107
VI.1.3. Tension de diffusion.....	109
VI.1.4. Largeur de la zone de charge d'espace .....	110
VI.2 Jonction abrupte polarisée.....	111
VI.2.1 Distribution des porteurs .....	113
a. Densités de porteurs aux limites de la zone de charge d'espace .....	113
b. Distribution des porteurs dans les régions neutres .....	115
IV.2.2. Courants de porteurs minoritaires .....	116
IV.2.3. Densité de courant - caractéristique .....	118
Applications.....	120
Références Bibliographiques.....	132

## Nomenclatures

$h, k, l$	indices de Miller	
BC	Bande de Conduction	
BV	Bande de Valence	
$D_{n,p}$	Coefficient de diffusion des électrons (indice n) ou des trous (indice p)	$(m^2 s^{-1})$
E	: Energie	(J ou eV)
$E_A$	Niveau d'énergie des états accepteurs	(J ou eV)
$E_C$	Energie du bas de la bande de conduction	(J ou eV)
$E_D$	Niveau d'énergie des états donneurs	(J ou eV)
$E_F$	Niveau de Fermi	(J ou eV)
$E_{Fi}$	Niveau de Fermi du matériau intrinsèque	(J ou eV)
$E_G$	Gap ou largeur de la Bande Interdite	(J ou eV)
$E_i$	Energie du milieu de la bande interdite $(E_C + E_V)/2$	(J ou eV)
$E_V$	Energie du haut de la bande de valence	(J ou eV)
$\vec{E}$	Champ électrique	$Vm^{-1}$
$fn(E)$	Probabilité d'occupation d'un niveau d'énergie E par un électron	
$fp(E)$	Probabilité d'occupation d'un niveau d'énergie E par un trou	
$G_{n,p}$	Taux de génération d'électrons (indice n) ou de trous (indice p) $m^{-3}s^{-1}$	
$h$	Constante de Planck	$(6,62 \times 10^{-34} J.s)$
$\hbar$	Constante de Planck réduite $(h/2\pi)$	
$\vec{j}$	Densité de courant	$Am^{-2}$
k	Constante de Boltzmann	$(1,38 \times 10^{-23} J.K^{-1})$
$L_{n,p}$	: Longueur de diffusion des électrons (indice n) ou des trous (indice p)	(m)
$m_n$	Masse effective des électrons	(kg)
$m_p$	Masse effective des trous	(kg)
$N_A$	Concentration en impuretés (dopant) de type accepteur	$(m^{-3} \text{ ou } cm^{-3})$
$N_A^-$	Concentration en impuretés ionisées de type accepteur	$(m^{-3} \text{ ou } cm^{-3})$
$N_C$	:Densité d'états équivalente dans la BC, ramenée en $E_C$	$(m^{-3} \text{ ou } cm^{-3})$
$N_D$	Concentration en impuretés (dopant) de type donneur	$(m^{-3} \text{ ou } cm^{-3})$
$N_D^+$	Concentration en impuretés ionisées de type donneur	$(m^{-3} \text{ ou } cm^{-3})$
$N_V$	Densité d'états équivalente dans la BV, ramenée en $E_V$	$(m^{-3} \text{ ou } cm^{-3})$
$n_0$	Concentration en électrons libres à l'équilibre thermodynamique	$(m^{-3} \text{ ou } cm^{-3})$
$n_i$	Concentration intrinsèque de porteurs libres	$(m^{-3} \text{ ou } cm^{-3})$
$p_0$	Concentration en trous libres à l'équilibre thermodynamique	$(m^{-3} \text{ ou } cm^{-3})$
$\sigma$ :	Conductivité = 1/Résistivité	$(\Omega .m^{-1})$
$\tau$	Durée de vie des porteurs libres	(s)
$\mu_n$	Mobilité des électrons	$cm^2/V.s$
$\mu_p$	Mobilité des des trous	$cm^2/V.s$

## Chapitre 01 : A- Semi-conducteurs cristallins

## I . Structure de l'état solide

### I.1 Familles de solides cristallins

- Cristaux ioniques (Na+Cl-...) : ions liés par attraction coulombienne, aucun électron libre (cristaux isolants), liaison très solide.
- Cristaux covalents (colonne IV : C, Si, Ge, Sn) : quatre électrons périphériques mis en commun avec quatre voisins (liaisons de valence), liaisons moins fortes que les liaisons ioniques.
- Métaux (Li, Na, K, Cu, Ag, Au) : conducteurs électriques (un électron libre par atome), température de fusion est moins élevée que celle des cristaux covalents
- Cristaux moléculaires comme leur nom l'indique, sont bâtis sur une unité de base qui n'est plus l'atome mais la molécule. Les forces de liaison sont grandes à l'intérieur de la molécule mais du type Van der Waals entre molécules et par conséquent faibles. Ces matériaux sont peu résistants et fondent à basse température

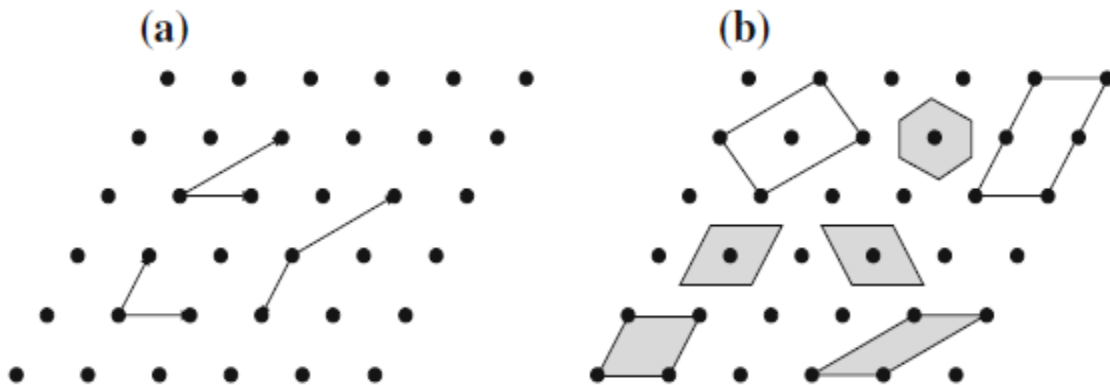
#### I.1.1 Structure cristalline :

Un cristal est construit par la répétition périodique (quasi) infinie d'un groupe de n particules qui constituent la cellule de base. Ce groupe (réseau de Bravais) est généré par les trois vecteurs de translation fondamentales  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

Ces trois vecteurs peuvent ne pas se trouver dans un plan commun. Le réseau (Fig I.1) est l'ensemble de tous les points R.

$\vec{a}_1, \vec{a}_2 ; \vec{a}_3$  appelés vecteurs primitifs. où  $n_1, n_2, n_3$  sont des nombres entiers.

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad (I.1)$$



*Fig. I.1 (a) Réseau bidimensionnel.*

*(b) Cellules élémentaires du réseau. Les cellules élémentaires primitives sont ombrées*



La structure cristalline est constituée quand l'on attache la même base d'atomes à chaque nœud du réseau (Fig. I.2).

Dans le plus simple cas, par exemple, pour des cristaux comme Cu, Fe ou Al

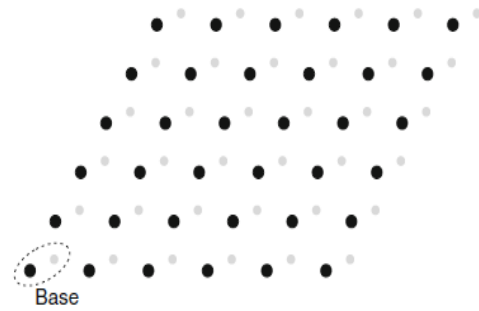


Figure I.2 Structure cristalline

Réseau + Base = structure cristalline

### I.1.2 Réseau cristallins

L'ensemble des points définis par les vecteurs  $\vec{R}$  pour toutes les valeurs de  $n_1, n_2, n_3$   $n_1, n_2$  et  $n_3$  constitue le réseau. Le parallélépipède construit sur les trois vecteurs primitifs constitue la maille primitive ou maille élémentaire. On remplit tout l'espace en appliquant à la maille élémentaire les opérations de translation définies par les vecteurs  $\vec{R}$ . Le volume de la maille élémentaire est défini par ::

$$V_d = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \vec{a}_2 \cdot (\vec{a}_1 \times \vec{a}_3) = \vec{a}_3 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_1)$$

Dans chaque maille élémentaire primitive, il y en a exactement un point de réseau. Le numéro de coordination est le nombre de points de réseau voisins.

Un réseau cubique primitif (pc), par exemple, a un numéro de coordination de 6.

La maille élémentaire primitive typiquement choisie est la cellule de Wigner – Seitz (WS) qui reflète au mieux la symétrie du réseau.

La maille de Wigner – Seitz autour d'un point de réseau  $R_0$  contient tous les points qui sont plus proches de ce point de réseau que de tout autre point de réseau.

Puisque tous les points remplissent une telle condition pour un point de réseau  $R_i$ , le Wigner – Seitz, les cellules remplissent complètement le volume. La limite de la cellule Wigner – Seitz est constituée par des points qui ont la même distance à  $R_0$  et à un ou plusieurs autres points du réseau.

La cellule de Wigner – Seitz autour de  $R_0$  est construite en traçant des lignes de  $R_0$  à la suivante voisins  $R_j$ , en prenant le point à mi-distance et en érigeant un plan perpendiculaire à  $(R_j + R_0) / 2$ .

La cellule WS est le plus petit polyèdre circonscrit par ces plans. Une construction bidimensionnelle est illustrée à la Fig. (I.3.a).

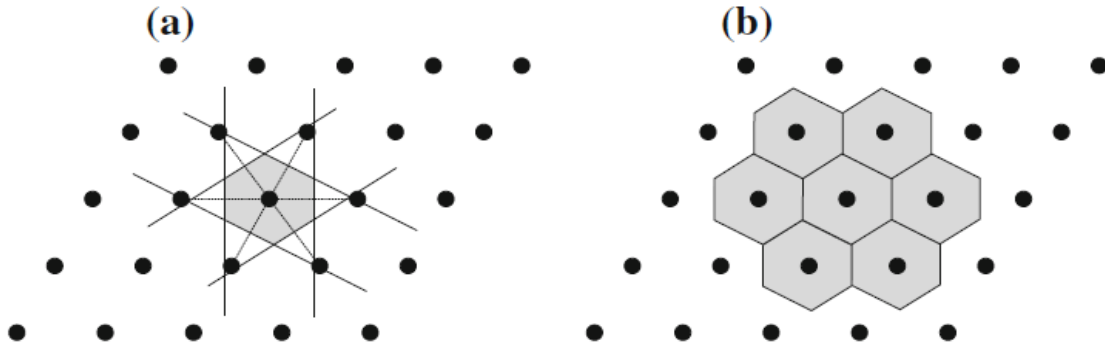


Fig. I.3 (a) Construction d'une cellule de Wigner – Seitz bidimensionnelle,  
(b) remplissage de l'espace avec WS cellules

### I.1.2.1 Groupe de points

Outre la translation, il existe d'autres opérations pour lesquelles le réseau est invariant, c'est-à-dire que le réseau est imagé en lui-même. L'élément neutre de tout groupe de points est l'identité qui ne change pas le cristal. Il est noté  $1(E)$  en notation internationale (Schönflies).

### I.1.2.2 Réseau de Bravais 2D

Il existe cinq réseaux de Bravais bidimensionnels (2D) (Fig. I.4) qui sont distincts et remplissent tout l'espace (2D). Celles-ci sont très importantes pour la description des symétries à surfaces. Les réseaux de Bravais 2D sont les carrés, hexagonaux, rectangulaires et rectangulaires centrés.

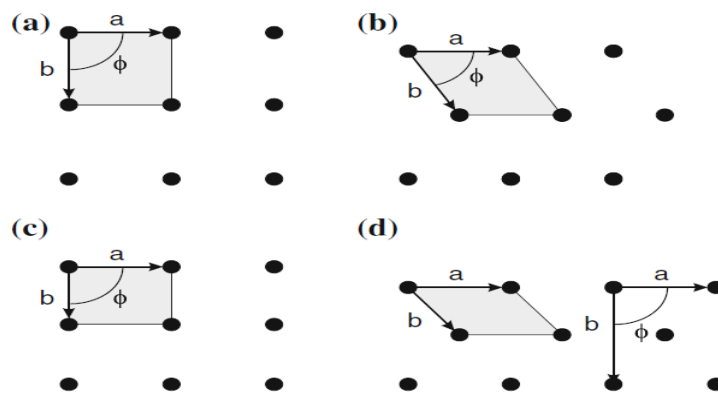


Fig I.4 Réseau de Bravais bidimensionnel avec le primitif cellules unitaires (a) réseau carré ( $a = b, \varphi = 90^\circ$ ), (b) réseau hexagonal ( $a = b, \varphi = 60^\circ$ ), (c) rectangulaire réseau ( $a \neq b, \varphi = 90^\circ$ ), (d) réseau rectangulaire centré ( $a \neq b, \varphi = 90^\circ$ , pour le (non primitif) rectangulaire cellule unitaire illustrée à droite)

**I.1.2.3 Réseau de Bravais 3D**

A dimensions, les opérations du groupe de points aboutissent à quatorze Bravais 3D réseaux (Fig.I.5), qui sont classés en sept systèmes cristallins (trigonales, monocliniques rhombique, tétragonale, cubique, rhomboédrique et hexagonale).

Ces systèmes sont discernées par les conditions sur longueurs et des vecteurs primitifs et des angles de vecteurs entre eux. Certains systèmes se déclinent sous plusieurs formes :

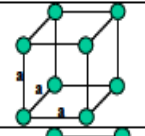
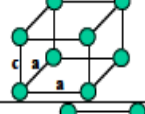
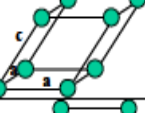
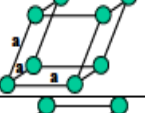
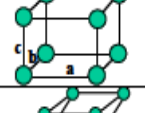
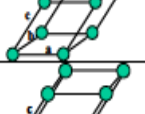

Le cristal cubique peut avoir un réseau simple (cs), centré sur la face (c f c) ou centré

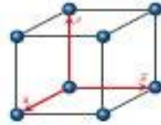
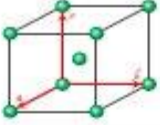
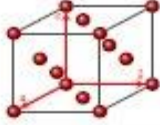


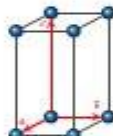
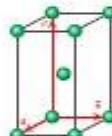
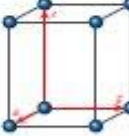
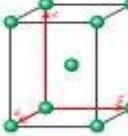
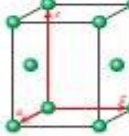
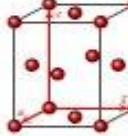
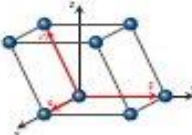
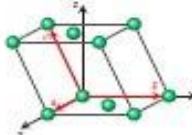
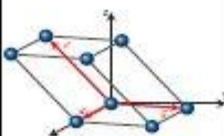
Le cristal est un arrangement périodique d'atomes répondant à un certain nombre de symétries qui sont l'inversion, la rotation, la réflexion dans un parallélépipède.

Il existe 7 classes de systèmes cristallins ou parallélépipèdes.

Le tableau ci-dessous recense ces systèmes qui sont différenciés par leurs angles et par les dimensions relatives des côtés.

**Tableau I .1 : les 7 systèmes cristallins**

Caractéristique	Type	Paramètres	Degré de symétrie	Forme
Régulier	Cubique	$a=b=c, \alpha=\beta=\gamma=\pi/2$	48	
Axe principal	Quadratique	$a=b\neq c, \alpha=\beta=\gamma=\pi/2$	16	
Axe principal	Hexagonal	$a=b\neq c, \alpha=\beta=\pi/2, \gamma=2\pi/3$	24	
Axe principal	Rhomboédrique	$a=b=c, \alpha=\beta=\gamma\neq\pi/2$	12	
Sans axe principal	Orthorhombique	$a\neq b\neq c, \alpha=\beta=\gamma=\pi/2$	8	
Sans axe principal	Monoclinique	$a\neq b\neq c, \alpha\neq\beta=\gamma=\pi/2$	4	
Sans axe principal	Triclinique	$a\neq b\neq c, \alpha\neq\beta\neq\gamma\neq\pi/2$	2	

Multiplicité	m = 2			m = 4
	Primitif (P)	Centré (I)	Bases centrées (C)	
Cubique $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma$				
Rhomboédrique $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$				
Hexagonal $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$				
Quadratique $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
Orthorhombique $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
Monoclinique $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta \neq 90^\circ$				
Triclinique $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$				

**Figure.I.5 Les 14 réseaux de Bravais tridimensionnels: cubique (cs: cubique simple, bcc: centrée sur le corps cubique, cfc: cubique face centrée), tétragonale (simple et centrée sur le corps), orthorhombique (simple, centrée, centré sur le corps et centré sur le visage), monoclinique (simple et centré), triclinique, rhomboédrique et hexagonale**

**I.1.2.3 .1 Réseaux cubiques cfc et cc**

Les vecteurs primitifs de translation pour le cristal cubique à faces centrées (cfc) et le cristal cubique centré (cc) sont représentés sur les Fig. I.6 et I.7, respectivement.

De nombreux métaux cristallisent dans ces réseaux, par exemple le cuivre (cfc) et le tungstène (cc).

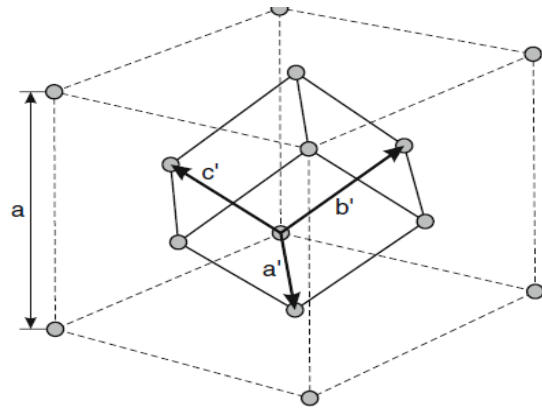
Dans le système cfc, un point du réseau se trouve au centre de chacune des six faces du cellule unitaire cubique habituelle.

Les vecteurs de la maille élémentaire primitive sont :

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(1,1,0)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(0,1,1)$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(1,0,1)$$



*Figure.I.6 maille élémentaire rhomboédrique d'un cristal cubique à faces centrées ; les vecteurs de translations fondamentaux  $a_1, a_2, a_3$  relient un sommet aux centres des faces, l'angle entre le vecteur est  $60^\circ$*

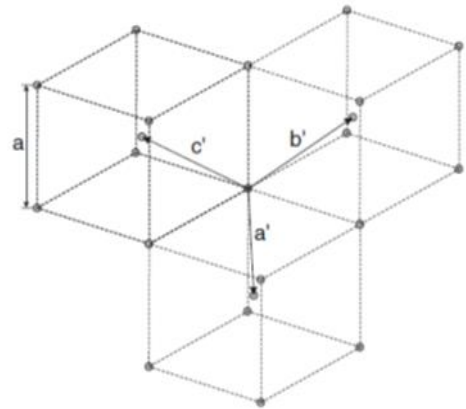
Le réseau cubique centré (cc) est constitué par un nœud à chaque sommet du cube et un nœud au centre du cube, c'est le réseau des métaux alcalins, avec un seul atome par cellule élémentaire

Les vecteurs de la maille élémentaire primitive sont :

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(1,1,-1)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(-1,1,1)$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(1,-1,1)$$



**Figure. I.7 Primitive translation du réseau cc.**

Ces vecteurs de l'origine avec les points du réseau dans les centres du cube. La maille élémentaire primitive est le rhomboèdre entouré par ces vecteurs. Les vecteurs primitifs de translation a, b et c sont donnés. L'angle entre les vecteurs est  $\approx 70,5^\circ$ .

### I.1.3. Plans réticulaires

#### - Indices de Miller

Pour définir un plan réticulaire du cristal, on utilise 3 indices déterminés de la manière suivante : soient x, y, z les coordonnées des intersections du plan à définir avec les axes sous-tendus par les vecteurs primitifs a, b, c (Fig. 1-8), soient  $1/x$ ,  $1/y$  et  $1/z$  leurs inverses, soient enfin h, k, l les trois entiers les plus petits possibles proportionnels à  $1/x$ ,  $1/y$  et  $1/z$ .

- Déterminer les coordonnées des points d'intersection du plan réticulaire avec les axes définis par les vecteurs de la maille (généralement la maille conventionnelle) :

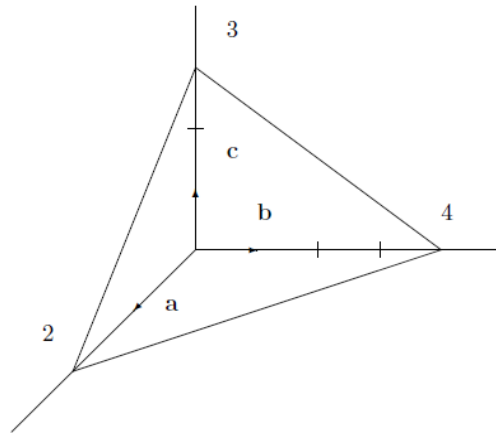


Figure. I.8 Indices de Miller du plan dessiné [6, 3, 4].

Dans l'exemple de la figure (I.8),  $x = 2, y = 4$  et  $z = 3$ . D'où  $1/x = 1/2, 1/y = 1/4$  et  $1/z = 1/3$  et les trois entiers  $h, k$  et  $l$  sont tels que :  $h = C \times 1/2, k = C \times 1/4$  et  $l = C \times 1/3$ . pour que  $h, k, l$  soient les plus petits possibles, il faut que  $C = 12$ .

Donc :  $h = 6, k = 3, l = 4$ .

Les entiers  $h, k, l$  sont appelés *indices de Miller*; ils définissent le plan réticulaire  $(hkl)$ . Le plan représenté sur la figure I.8 est le plan (634).

Un triplet d'indices de Miller permet donc de caractériser une famille de plan réticulaires parallèles entre eux.

La figure (1.9.a) représente les plans (100), (010), (001), l'ensemble des plans, c'est-à-dire l'ensemble des faces du parallélépipède, s'écrit  $\{100\}$ . La direction perpendiculaire à un plan  $(hkl)$  s'écrit  $[hkl]$ .

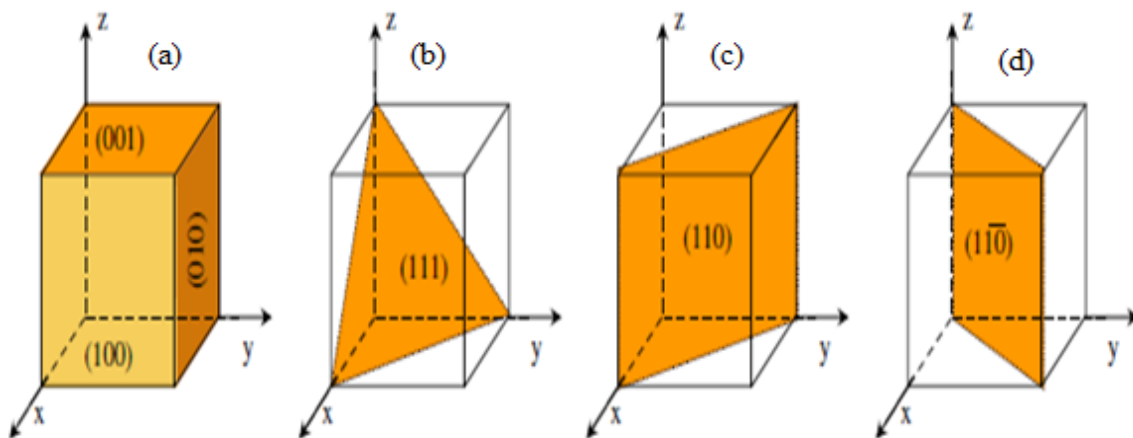
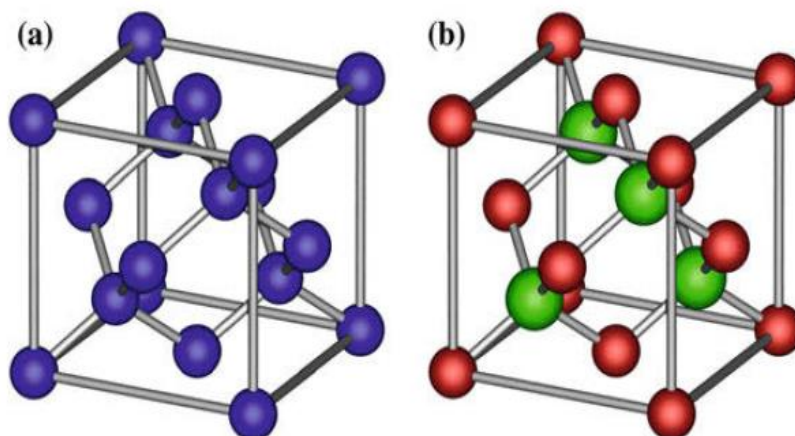


Figure 1.9 Indices de quelques les plans (100), (110), (111). et (110).

### I.1.4 structure du diamant

Le réseau du silicium est celui du diamant, il est constitué de deux réseaux cubiques faces centrées, imbriqués, décalés l'un de l'autre du quart de la diagonale principale (Fig. 1-5). Bien que le silicium soit un matériau monoatomique, la cellule élémentaire contient deux atomes de silicium, les atomes en position  $(0,0,0)$  et  $(1/4,1/4,1/4)$ . Chaque atome a une coordination tétraédrique et établit des liaisons covalentes avec chacun de ses quatre voisins.



*Figure.I.10.a Structure en diamant (b) structure en zincblende (sphères rouges: atomes A, sphères vertes: Atomes B).*

Le réseau de la blende ZnS est une variante du précédent, il est constitué de deux réseaux cubiques faces centrées, l'un de Zn l'autre de S, décalés du quart de la diagonale principale. C'est le réseau dans lequel cristallisent la plupart des composés III-V et certains composés II-VI. Chaque atome III a une coordination tétraédrique avec quatre atomes V et vice versa. Les atomes étant différents, les liaisons sont partiellement covalentes et partiellement ioniques. La cellule élémentaire contient un atome III et un atome V

De nombreux semi-conducteurs composés importants, tels que GaAs, InAs, AlAs, InP, GaP et leurs alliages, mais aussi les composés II – VI ZnS, ZnSe, ZnTe, HgTe et CdTe et les halogénures, y compris AgI, CuF, CuCl, CuBr et CuI, cristallisent dans la structure de zincblende.

#### I.1.4.1 Semi-conducteurs de la colonne IV (Ge, Si) – Réseau diamant

- Les électrons d'un atome isolé prennent des valeurs d'énergie discrètes
- Pour chaque niveau : nombre limité d'électrons ( $2n^2$ )
- Les niveaux les plus proches du noyau sont occupés
- Pour le silicium : Numéro atomique  $Z = 14$  ; 2 électrons sur la première couche ( $n = 1$ )  
8 sur la seconde ( $n = 2$ ) ; 4 sur la dernière (nombre de places = 18) ( $n = 3$ )

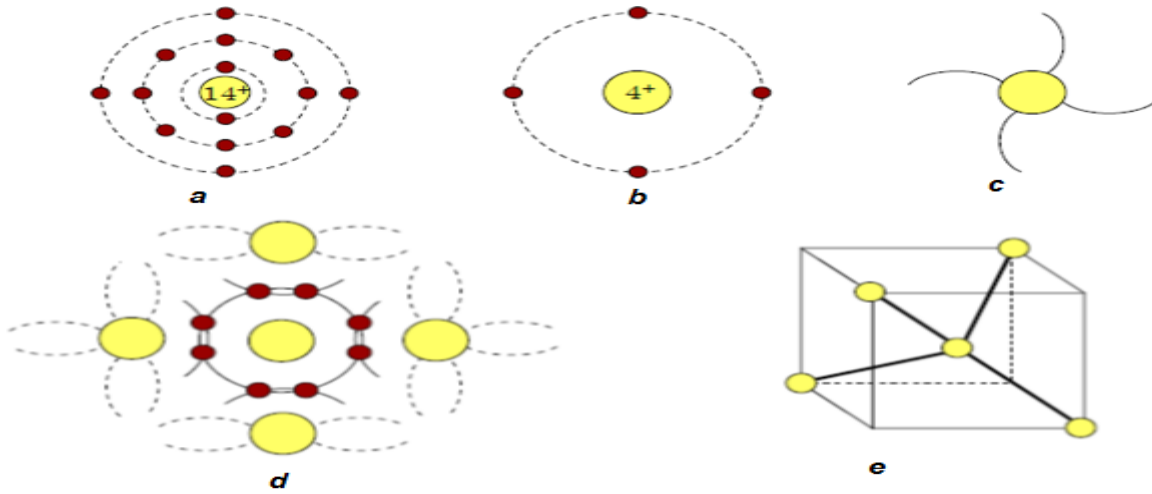


Figure I.11 Représentations de l'atome de Silicium faisant apparaître. a. Les niveaux d'énergie et électrons les occupant. b. Le dernier niveau d'énergie. c. Les quatre liaisons covalentes possibles. d. Association d'un atome de Silicium avec ses quatre voisins. e. En projection plane en trois dimensions.

### I.1.5 Réseau réciproque

Le réseau réciproque prend toute son utilité dans l'étude des phénomènes de propagation électromagnétique dans le réseau cristallin ; en effet, l'analyse des réseaux depuis le début de la cristallographie s'effectue essentiellement par analyse d'un faisceau de photons diffractés. L'interaction photon-atome transforme le faisceau et aboutit à une transformée de Fourier du faisceau de photon incident. L'image du réseau n'est plus dans ce cas une image directe, mais une image transformée.

Cette nouvelle image du réseau, qui sera celle observée par les cristallographes est appelée réseau réciproque. En d'autres termes, l'image d'un réseau cristallin, donne aussi un réseau contenant des nœuds, mailles etc.. , mais qui sera de type différent de celui du réseau dit direct.

Les symétries cristallines se retrouvent dans les propriétés des grandeurs physiques du cristal. En particulier, la périodicité de la structure cristalline entraîne que, sauf cas particulier, les grandeurs physiques caractérisant le cristal (densité, charge électrique, aimantation, ...) sont périodiques, et sont par conséquent décomposables en série de Fourier.

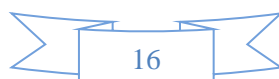
$$\rho(\mathbf{r} + \mathbf{t}) = \rho(\mathbf{r}) \quad (\text{I.3})$$

Considérons pour simplifier le problème, un réseau à une dimension. La densité d'électrons s'écrit :

$$\rho(x + t) = \rho(x) \quad (\text{I.4})$$

avec  $t = na$ , où  $a$  est la périodicité.

La fonction  $\rho(x)$  étant périodique, on peut la décomposer en série de Fourier :





$$\rho(x) = \rho_0 + \sum_{\rho > 0} \left[ C_p \cos\left(p \frac{2\pi}{a} x\right) + S_p \sin\left(p \frac{2\pi}{a} x\right) \right]$$

$$\rho(x + na) = \rho_0 + \sum_{\rho > 0} \left[ C_p \cos\left(p \frac{2\pi}{a} (x + na)\right) + S_p \sin\left(p \frac{2\pi}{a} (x + na)\right) \right]$$

$$\rho(x + na) = \rho_0 + \sum_{\rho > 0} \left[ C_p \cos\left(p \frac{2\pi}{a} x\right) + S_p \sin\left(p \frac{2\pi}{a} x\right) \right] = \rho(x)$$

Le point d'abscisse  $p \frac{2\pi}{a}$  est un point de l'espace de Fourier du cristal, que l'on appelle aussi espace réciproque,  $p$  étant un nombre entier cet espace est périodique de période  $\frac{2\pi}{a}$ .

Ainsi, au réseau de périodicité  $a$  que l'on appellera désormais réseau direct ou réseau de Bravais, correspond un réseau de périodicité  $A = \frac{2\pi}{a}$  que l'on appelle réseau réciproque.

La zone comprise entre  $-a/2$  et  $+a/2$  dans le réseau direct constitue la maille élémentaire du réseau direct, la zone comprise entre  $-\pi/a$  et  $+\pi/a$  dans le réseau réciproque constitue la maille élémentaire du réseau réciproque, on l'appelle 1<sup>ère</sup> zone de Brillouin.

Au même titre que le réseau direct est parfaitement défini par la maille élémentaire et la périodicité, le réseau réciproque est parfaitement défini par la 1<sup>ère</sup> zone de Brillouin et la périodicité.

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

L'extension à trois dimensions de l'analyse de Fourier précédente, ne présente aucune difficulté.

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \tag{I.7}$$

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

Les vecteurs du réseau réciproque sont définis par les relations précédentes et de plus par les conditions  $\vec{A} \cdot \vec{b} = \vec{A} \cdot \vec{c} = 0, \vec{B} \cdot \vec{a} = \vec{B} \cdot \vec{c} = 0, \vec{C} \cdot \vec{b} = \vec{C} \cdot \vec{a} = 0$ , soit

$$\vec{A} = 2\pi \frac{b \times c}{a \cdot b \times c} \quad \vec{B} = 2\pi \frac{c \times a}{a \cdot b \times c} \quad \vec{C} = 2\pi \frac{a \times b}{a \cdot b \times c} \quad (\text{I.8})$$

### I.1.6 Zone de Brillouin

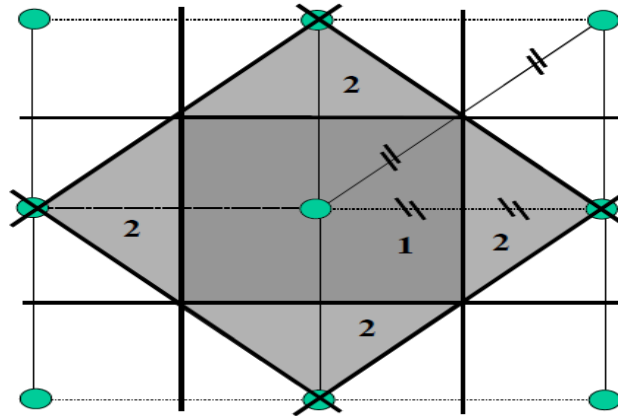
Cette zone se détermine dans le réseau réciproque. En effet, la zone de Brillouin va correspondre au domaine d'influence d'un atome sur les autres atomes voisins. Il faudra raisonner sur les énergies, et donc en fonction des fonctions d'onde. Intuitivement, plus les atomes sont éloignés de l'atome considéré, moins ils auront d'influence.

Nous allons ainsi définir des zones d'influence, donc essentiellement avec les plus proches voisins.

La notion même de fonction d'onde, rappelle que la quantité de mouvement est très étroitement liée au terme spatialement dépendant de la fonction d'onde. L'espace des phases (les vecteurs  $k$ ) va en pratique correspondre à celui du réseau réciproque (son origine en fait). Par définition, la zone de Brillouin, est la maille de Wigner-Seitz correspondante. Cette maille est déterminée par les plans médiateurs entre les plus proches voisins d'un atome.

Pour simplifier cette présentation, nous pouvons prendre l'exemple d'un réseau bidimensionnel et carré.

La figure (I.12) met en évidence la première zone de Brillouin repérée par 1 et la deuxième zone repérée par 2, délimitées dans ce cas par les médiatrices (des droites).



*Figure I.12 : Représentation dans un réseau bidimensionnel des deux premières zones de Brillouin, notées 1 et 2 sur la figure. Elles sont obtenues à partir de la construction de médiatrices successives entre les plus proches voisins. Médiatrices verticales et horizontales pour la zone 1, à  $\pi/4$  pour la zone 2.*

### I.1.7. Densité d'états dans l'espace réciproque

Les vecteurs  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ , et  $\vec{A}, \vec{B}, \vec{C}$ , étant respectivement les vecteurs du réseau direct et du réseau réciproque, les volumes des mailles élémentaires du réseau direct et du réseau réciproque sont donnés par :

$$V_d = \vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c} \qquad V_r = \vec{A} \cdot \vec{B} \times \vec{C}$$

Il y a un point  $k$  par maille élémentaire de l'espace réciproque de sorte que la densité d'états dans l'espace réciproque est donnée par  $v(k) = 1 / V_r$ . Mais chaque maille élémentaire de l'espace réciproque correspond à une maille élémentaire de l'espace direct, c'est-à-dire à un volume  $V_d$  de cristal. Ainsi la densité d'états dans l'espace réciproque, par unité de volume du cristal, est donnée par :

$$g(k) = \frac{v(k)}{V_d} = \frac{1}{V_d V_r} = \frac{1}{(\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c})(\vec{A} \cdot \vec{B} \times \vec{C})} \qquad (I.9)$$

Ainsi en explicitant les vecteurs de base  $\vec{A}, \vec{B}, \vec{C}$ , et en prenant en compte la double dégénérescence de spin des états électroniques, la densité d'états dans l'espace des  $k$  par unité de volume de cristal est donnée par :

$$g(k) = \frac{2}{(2\pi)^3} \qquad (I.10)$$

D'une manière plus générale dans un système à  $n$  dimensions, la densité d'états dans l'espace réciproque est donnée par :

$$g(k) = \frac{2}{(2\pi)^n} \qquad (I.11)$$

**Chapitre II : Etats électroniques du semi-conducteur**

## II.1. Des orbitales atomiques à la structure de bandes

### II.1.1 Orbitales atomiques

Considérons le plus simple de tous les atomes, l'atome d'hydrogène. Il est constitué d'un électron de charge  $-e$  gravitant autour d'un noyau de charge  $+e$ .

L'Hamiltonien de l'électron dans son mouvement autour du noyau s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(r) \quad (\text{II.1})$$

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

$$H\phi_{nlm}(r, \theta, \phi) = E_{nl} \phi_{nlm}(r, \theta, \phi) \quad (\text{II.2})$$

$n$  est le nombre quantique principal,  $l$  est le nombre quantique azimutal, il représente le moment angulaire de l'électron dans son mouvement autour du noyau.

$m$  représente la projection du moment angulaire sur un axe choisi comme axe de quantification. Les valeurs possibles de  $n$  sont  $n = 1, 2, \dots$ , pour chaque valeur de  $n$  il existe  $n$  valeurs de  $l$ ,  $l = 0, 1, \dots, n-1$ , pour chaque valeur de  $l$  il existe  $2l+1$  valeurs de  $m$ ,  $m = -l, -(l-1), \dots, l-1, l$ . Dans la terminologie courante les états correspondant aux différentes valeurs de  $l$  portent des noms spécifiques

$$\text{Etat } s \quad l = 0$$

$$\text{Etat } p \quad l = 1$$

$$\text{Etat } d \quad l = 2$$

$$\text{Etat } f \quad l = 3$$

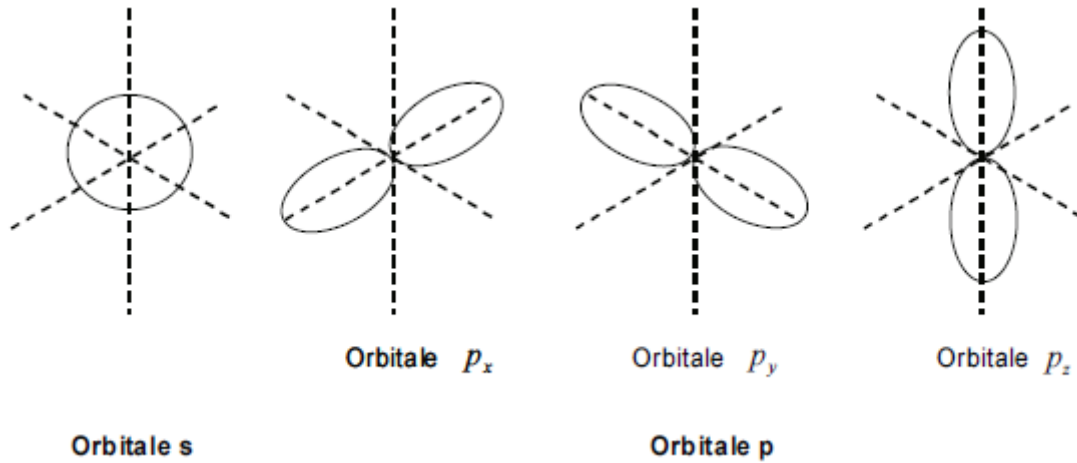
On écrit les différents états électroniques sous la forme  $1s; 2s, 2p; 3s, 3p, 3d; \dots$

A chaque fonction propre  $\phi_{nlm}$  correspond une valeur propre  $E_{nlm}$ . Dans le cas de l'atome isolé, en raison de la symétrie sphérique du potentiel les niveaux correspondant aux mêmes valeurs de  $n$  et de  $l$  sont tous confondus,  $E_{nlm} = E_{nl}$  quel que soit  $m$ . En outre dans le cas de l'atome d'hydrogène, en raison de la nature en  $1/r$  du potentiel coulombien, les niveaux correspondant aux mêmes valeurs de  $n$  sont tous confondus,  $E_{nl} = E_n$  quel que soit  $l$ . Si le

zéro de l'énergie correspond à l'électron complètement séparé du noyau sans énergie cinétique, les niveaux d'énergie  $E_n$  sont donnés par :

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

$R = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13.6eV$  :est la constante de Rydberg. Les orbitales s ( $l = 0$ ) et p ( $l = 1$ ) sont représentées sur la figure (II.1). Le rayon de Bohr de l'état fondamental  $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^4} = 0.529\text{\AA}$ .



*Figure II.1 : Orbitales atomiques s et p*

Dans le cas plus général, un atome de nombre atomique  $Z$  est constitué d'un noyau de charge  $+Ze$  et d'un nuage électronique de  $Z$  électrons. Les électrons de la couche externe sont appelés électrons de valence, les électrons des couches internes sont appelés électrons du cœur.

Les électrons de valence jouent un rôle essentiel d'une part dans les propriétés chimiques des matériaux et d'autre part dans leurs propriétés électriques.

Le potentiel que voit un électron de valence est le potentiel coulombien du noyau écranté, d'une part par les électrons du cœur et d'autre part par les autres électrons de valence. Le potentiel résultant peut encore être supposé central, c'est-à-dire à symétrie sphérique, mais il ne varie plus en  $1/r$  comme dans le cas unique de l'atome d'hydrogène. Il en résulte que les états correspondant aux différentes valeurs de  $m$  restent dégénérées, mais que les états correspondant aux différentes valeurs de  $l$  ont des énergies différentes.

La différence d'énergie  $np - ns$  augmente à mesure que le potentiel s'éloigne d'une variation en  $1/r$ , c'est-à-dire à mesure que le nombre d'électrons de valence augmente. En d'autres termes, sur une même ligne du tableau périodique, l'écart d'énergie  $np - ns$  augmente avec le nombre atomique. Sur la ligne du Lithium par exemple, les valeurs sont les suivantes (W.A.Harrison, 1980).

	Li	Be	B	C	N	O	F
$E_{2p} - E_{2s}(eV)$		4.04	5.88	8.52	11.52	15.04	18.84

### II.1.2. Orbitales moléculaires

Considérons la molécule la plus simple, la molécule d'hydrogène. Elle est constituée de deux noyaux autour desquels gravitent deux électrons. Négligeons l'interaction électron-électron, chacun des électrons est dans un potentiel résultant des potentiels coulombiens de chacun des noyaux. L'Hamiltonien d'un électron s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(r - R_1) + V(r - R_2) \quad (\text{II.3})$$

où  $R_1$  et  $R_2$  représentent les positions des noyaux. La distance  $R_1 R_2$  est de 0,74 Å dans la molécule d'hydrogène. L'équation aux valeurs propres s'écrit :

$$H\psi(r) = E\psi(r) \quad (\text{II.4})$$

Les fonctions d'onde  $\psi(r)$  sont appelées *orbitales moléculaires*.

Quand les deux atomes sont suffisamment éloignés, les états électroniques sont représentés par des orbitales atomiques. Au fur et mesure que les deux atomes se rapprochent, ces états atomiques se couplent pour donner naissance à des états moléculaires qui deviennent alors les

nouveaux états propres du système.

$$\psi(r) = C_1\phi(r - R_1) + C_2\phi(r - R_2) \quad (\text{II.5})$$

En utilisant le formalisme de Dirac et en appelant  $1s$  l'état de valence de l'atome d'hydrogène, cette expression s'écrit.

$$|\psi\rangle = C_1|1s\rangle_1 + C_2|1s\rangle_2 \quad (\text{II.6})$$

En portant cette expression de  $|\psi\rangle$  dans l'équation de Schrödinger (II.4) et en multipliant à gauche successivement par  $\langle 1s|_1$  et  $\langle 1s|_2$  on obtient les deux équations

$$\begin{aligned} (E_{1s} - E)C_1 - V_2C_2 &= 0 \\ -V_2C_2 + (E_{1s} - E)C_2 &= 0 \end{aligned} \quad (\text{II.7})$$

Ou  $E_{1s} = {}_1\langle 1s|H|1s\rangle_1 = {}_2\langle 1s|H|1s\rangle_2$  est l'énergie de l'électron dans chacun des atomes isolés et  $V_2 = -{}_1\langle 1s|H|1s\rangle_2 = -{}_2\langle 1s|H|1s\rangle_1$  représente l'énergie de couplage entre les deux atomes. Nous avons négligé l'intégrale de recouvrement :  ${}_1\langle 1s|1s\rangle_2$

La solution du système est donnée par le déterminant séculaire

$$\begin{vmatrix} (E_{1s} - E) & -V_2 \\ -V_2 & (E_{1s} - E) \end{vmatrix} \quad (\text{II.8})$$

c'est-à-dire :

$$E_1 = E_{1s} - V_2 \quad (\text{II.9.a})$$

$$E_a = E_{1s} + V_2 \quad (\text{II.9.b})$$

En portant ces valeurs dans le système (II.8) on obtient les coefficients  $C_1$  et  $C_2$  pour les deux états moléculaires  $C_{1l} = C_{2l} = 1/\sqrt{2}$ ,  $C_{1a} = C_{2a} = 1/\sqrt{2}$ , Les orbitales moléculaires sont données en fonction des orbitales atomiques par les expressions :

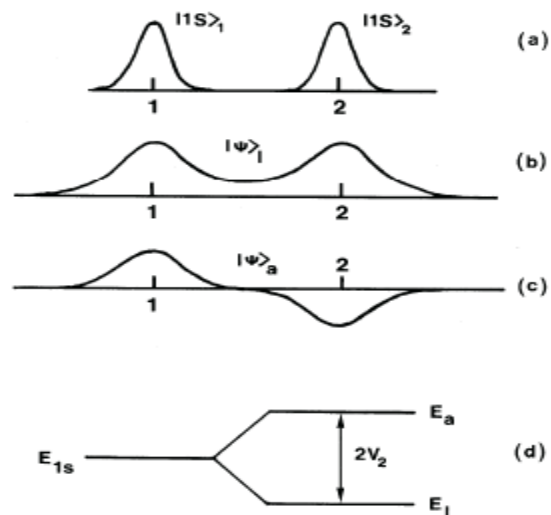
$$|\psi\rangle_l = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1s\rangle_1 + |2s\rangle_2] \quad (\text{II.10.a})$$

$$|\psi\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1s\rangle_1 - |2s\rangle_2] \quad (\text{II.10.b})$$

Les orbitales atomiques  $|1s\rangle_1, |2s\rangle_2$  et moléculaires  $|\psi\rangle_a, |\psi\rangle_l$  ainsi que les niveaux d'énergie atomiques et moléculaires sont représentés sur la figure (II.2).

L'orbitale  $|\psi\rangle_l$  est l'orbitale liante, l'orbitale  $|\psi\rangle_a$  est l'orbitale antiliante.

Il faut noter que dans l'association des deux atomes la densité d'états est conservée et qu'en outre, à l'équilibre thermodynamique, les électrons occupent les états de plus basse énergie. Ainsi les deux états atomiques  $|1s\rangle$  dégénérés deux fois compte tenu du spin, donnent naissance à deux états moléculaires dégénérés deux fois. Les deux électrons occupent l'état liant  $|\psi\rangle_l$ , qui est l'état de plus basse énergie.



*Figure II.3 : Molécule d'hydrogène,*



### II.1.3 La molécule de carbone

Le cas de la molécule d'hydrogène est très simple mais unique dans la mesure où seul l'état atomique  $1s$  conditionne la liaison de la molécule. Dans tous les autres cas, les états  $s$  et  $p$  contribuent à la liaison. Considérons le cas -plus compliqué- de la molécule de carbone  $C_2$ . Chacun des deux atomes de carbone a des états de valence  $2p$  et  $2s$ , représentés par une orbitale  $s$  et trois orbitales  $p$ . Les états moléculaires (dans  $C_2$ ) résultent des couplages de tous ces états, de sorte que de façon générale, les fonctions d'onde ou orbitales moléculaires peuvent s'écrire :

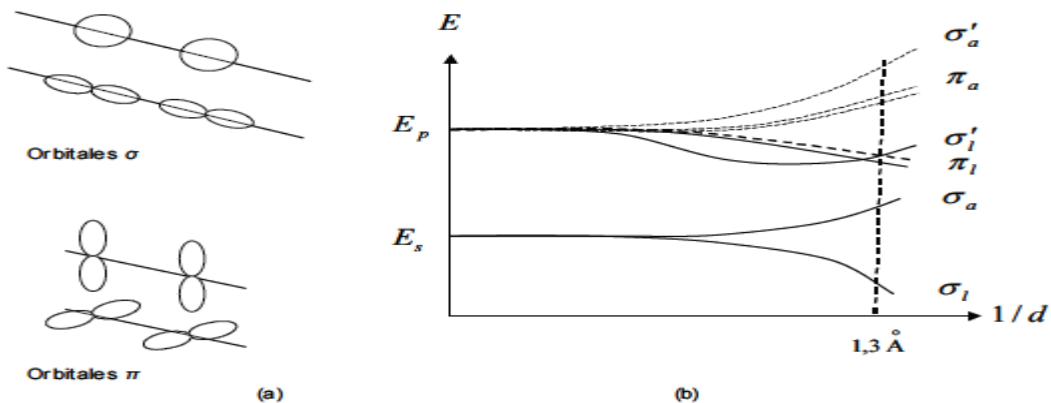
$$|\psi\rangle_l = A_1^i |1s\rangle_1 + A_2^i |2p_x\rangle_1 + A_3^i |2p_y\rangle_1 + A_4^i |2p_z\rangle_1 + B_1^i |2s\rangle_2 + B_2^i |2p_x\rangle_2 + B_3^i |2p_y\rangle_2 + B_4^i |2p_z\rangle_2 \quad (\text{II.11})$$

En fait si on appelle  $x$  l'axe qui porte les deux atomes de carbone, certaines orbitales atomiques ne se couplent pas pour des raisons de symétrie. Les orbitales  $p_y$  de chacun des atomes sont uniquement couplées entre elles pour donner naissance à des combinaisons liantes et des combinaisons antiliantes. Il en est de même des orbitales  $p_z$ .

Les quatre orbitales moléculaires qui en résultent sont appelées orbitales  $\pi$ . Il y a deux orbitales liantes  $\pi$  et deux orbitales antiliantes  $\pi_a$ .

Les orbitales  $s$  et  $p_x$  sont couplées pour donner naissance à des orbitales que l'on appelle orbitales  $\sigma$ . Il y a deux orbitales liantes  $\sigma_l$  et deux orbitales antiliantes  $\sigma_a$  formées de combinaisons linéaires des orbitales  $|2s\rangle_1, |2s\rangle_2, |2p_x\rangle_1, |2p_x\rangle_2$ .

On dit que dans la molécule, les états  $s$  et  $p$  sont hybridés. Dans la mesure où les orbitales  $s$  sont couplées avec une seule des composantes des orbitales  $p$  on dit que l'hybridation est du type  $sp^1$  ou plus simplement  $p$ . La figure (II.4) représente les différentes orbitales atomiques et les états d'énergie correspondants.



**Figure II.4 : Molécule de carbone. a) Couplage des orbitales.  
b) Energies en fonction de la distance interatomique**

Considérons, comme dans la molécule  $H_2$ , la population électronique. Chaque atome de carbone est caractérisé par une couche de valence  $2s^2 2p^2$ , c'est-à-dire dispose (compte tenu de la dégénérescence de spin) de  $2 \times 2^2$  soient 8 états de valence peuplés par 4 électrons (2 électrons  $s$  et 2 électrons  $p$ ).

La molécule  $C_2$  dispose donc de  $2 \times 8$  états: 4 états liants dégénérés deux fois et 4 états antiliants dégénérés également deux fois, peuplés par  $2 \times 4$  électrons. Lorsque la molécule se trouve dans son état fondamental, les 8 électrons occupent les orbitales de plus basse énergie. Ces orbitales sont représentées en traits pleins sur la figure II.20. L'état d'équilibre de la molécule de carbone correspond à une distance internucléaire de 1,3 Å. Ainsi, dans la molécule  $C_2$ , les électrons occupent l'orbitale liante  $\sigma_l$ , les deux orbitales liantes  $\pi_l$  et l'orbitale antiliante  $\sigma_a$ . L'état de la molécule s'écrit  $\sigma_l^2, \sigma_a^2, \pi_l^4$ . En fait comme le montre la figure, les états  $p_b$  et  $s'_b$  sont très proches de sorte que la prise en considération des interactions électron-électron met la molécule dans l'état  $\sigma_l^2, \sigma_a^2, \pi_l^4, \sigma'_l^2$

### II.1.4- Cas du solide : Conducteur - Isolant – Semiconducteur

Par analogie avec la molécule de carbone, résultant de l'association de 2 atomes de carbone, considérons le carbone diamant constitué d'un réseau de  $N$  atomes de carbone. Le raisonnement développé pour la molécule peut être étendu au cas du solide avec maintenant une densité d'atomes de l'ordre de  $10^{22} \text{cm}^{-3}$ .

Considérons des atomes de carbone arrangés aux nœuds d'un réseau périodique, mais avec une maille très grande. Tant que la distance entre atomes est grande l'état de valence de chaque atome est  $2s^2 2p^2$ , la structure ramenée à deux dimensions, pour des raisons évidentes de simplicité, est représentée sur la figure (II .5 .a), les états d'énergie correspondants sont représentés par les énergies  $E_s$  et  $E_p$  sur la figure (II .5 .c). Rapprochons homothétiquement les atomes les uns des autres.

Les états de valence se couplent, et ceci d'autant plus que la distance interatomique diminue. La structure est représentée sur la figure (II .5 .b), l'évolution des états d'énergie est schématisée sur la figure (II .5 .c). Les états atomiques s'élargissent pour donner naissance non pas à  $2 \times 4$  états liants et  $2 \times 4$  états anti liants discrets, comme dans la molécule, mais à

$N \times 4$  états liants et  $N \times 4$  états anti liants repartis en deux ensembles, disjoints ou non suivant la distance internucléaire. Ces deux ensembles d'états constituent dans l'espace des

énergies, des bandes permises pour les électrons. L'évolution des états liants et anti liants avec la distance atomique est représentée sur la figure (II .5 .c).

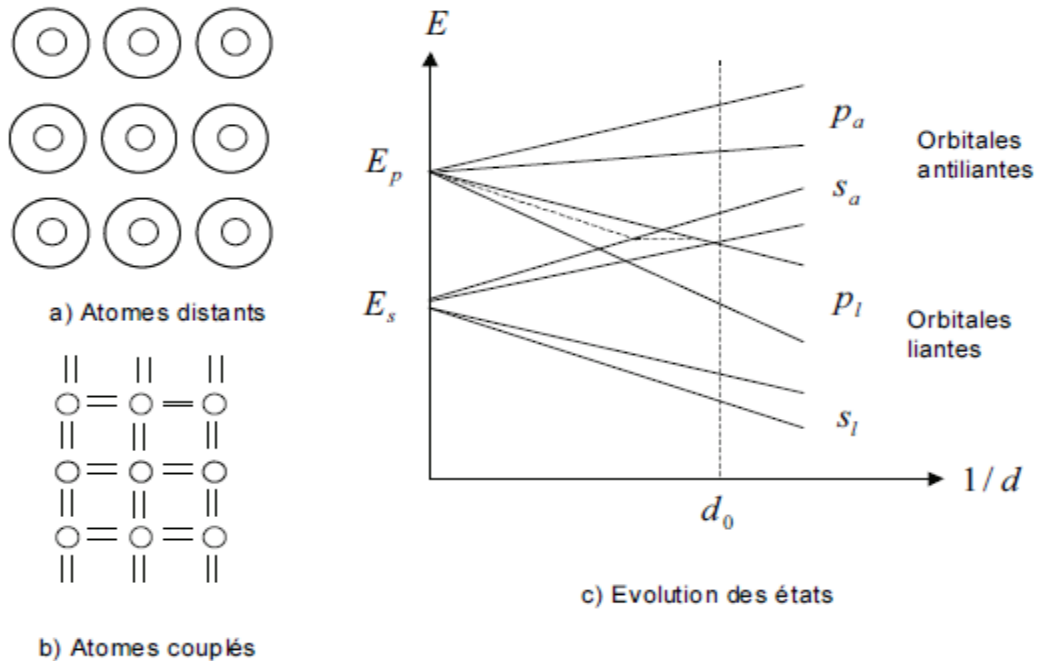


Figure II .5 : Energies des états en fonction de la distance interatomique

Lorsque  $1/d$  tend vers zéro, les atomes sont dissociés, les états d'énergie  $E_s$  sont occupés par  $2N$  électrons et ceux d'énergie  $E_p$  par  $2N$  électrons. Lorsque  $1/d$  augmente (c'est-à-dire que  $d$  diminue), les états  $s$  donnent naissance à  $N$  états liants occupés par  $N$  électrons et  $N$  états antiliants occupés par  $N$  électrons; les états  $p$  donnent naissance à  $3N$  états liants occupés par  $2N$  électrons et  $3N$  états antiliants vides.

Pour une distance donnée, la population des bandes permises est fonction de la différence entre l'éclatement  $s$ - $p$  dans l'atome isolé et l'éclatement liant-antiliant dans la liaison chimique entre atomes du cristal.

Examinons maintenant les propriétés électriques du matériau, elles sont fonction des populations électroniques des différentes bandes permises. La conduction électrique résulte du déplacement des électrons à l'intérieur de chaque bande. Sous l'action du champ électrique appliqué au matériau, l'électron acquiert un gain d'énergie cinétique dans la direction du champ (en sens opposé) et se déplace dans le cristal en passant d'une orbitale liante (antiliante) sur une autre orbitale liante (antiliante). Ce transfert est rendu possible par le recouvrement des orbitales voisines et est d'autant plus facile que le recouvrement est important, c'est-à-dire que les orbitales sont délocalisées.

Considérons tout d'abord une bande vide, il est évident qu'elle ne participe pas au courant électrique en raison simplement de l'absence d'électrons. Considérons une bande pleine, elle ne participe pas davantage à la conduction électrique mais pour une toute autre raison. L'électron se déplace sous l'action du champ électrique en raison du gain d'énergie  $\Delta E$  que lui communique le champ dans sa direction, mais ce déplacement n'est possible que dans la mesure où l'électron d'énergie  $E$  trouve, dans la bande, une place disponible à l'énergie  $E + \Delta E$ , or ce n'est pas le cas pour une bande pleine. Ainsi un matériau

Qui ne dispose que de bandes pleines et de bandes vides est un isolant. Un conducteur est un matériau dans lequel une bande est partiellement occupée. Il est évident que si la bande est presque vide la conduction est proportionnelle au nombre d'électrons. Si par contre la bande est presque pleine, la conduction est proportionnelle au nombre de places vides.

La conduction électrique sera ainsi d'autant meilleure que la population de la bande se rapprochera de 50%.

Revenons sur la figure (II .5 .c), dans la partie gauche de la figure, correspondant à des distances interatomiques grandes ( $1/d < 1/d_0$ ), l'éclatement liant-antiliant est inférieur à l'éclatement atomique  $s - p$ . Dans ce cas les états  $s_l$  et  $s_a$  liants et antiliants sont pleins, les états  $p_l$  liants sont occupés aux  $2/3$ . Cette bande incomplète est spécifique de la conduction métallique, le matériau est conducteur.

Dans la partie droite de la figure ( $1/d > 1/d_0$ ) la distance interatomique est faible, l'éclatement liant-antiliant est plus important que l'éclatement atomique  $s - p$ , et par suite la bande  $s_a$  a une énergie supérieure à la bande  $p_l$ . La bande  $s_a$  se vide alors de ses  $N$  électrons qui vont occuper les  $N$  places qui restent disponibles dans la bande  $p_l$ .

Il en résulte que tous les états liants sont occupés et tous les états antiliants sont vides. Le matériau est isolant au zéro degré absolu. La dernière bande pleine est la bande de valence, la première bande vide est la bande de conduction. Il existe une bande interdite entre le sommet de la bande de valence et le bas de la bande de conduction, cette bande interdite est appelée le gap du matériau, sa valeur s'écrit  $E_g$ .

La différence entre l'isolant et le semiconducteur est moins nette que la différence entre l'isolant et le conducteur. Cette différence est essentiellement liée au rapport qui existe entre le gap du matériau et l'énergie d'agitation thermique des électrons à la température ambiante. Lorsque  $E_g$  est très grand, l'énergie thermique, à la température ambiante, n'est pas suffisante pour exciter un nombre conséquent d'électrons depuis la bande de valence vers la bande de conduction, le matériau est alors isolant ( $E_g > 200 k_B T$ ). Par contre lorsque le gap diminue

( $E_g < 200 k_B T$ ), un certain nombre d'électrons sont excités dans la bande de conduction par agitation thermique et le matériau présente une conductivité qui, sans être comparable à celle

d'un métal, peut devenir appréciable. Le matériau est dit semiconducteur.

Il faut noter en outre que l'éclatement liant-antiliant représenté sur la figure (II.5.c), qui conditionne les largeurs des bandes de valence et de conduction et par suite le gap du matériau, est essentiellement fonction de la taille des atomes et de la distance interatomique. Or cette distance interatomique est différente suivant la direction considérée dans le cristal. Dans la structure tétraédrique du silicium par exemple, la distance interatomique est plus faible dans la direction (111) que dans la direction (100). Ainsi la structure de bandes d'énergie du matériau sera représentée par les courbes  $E_v(k)$  et  $E_c(k)$  qui représentent les énergies des états liants et antiliants en fonction du vecteur de propagation  $k$ .

La spécificité des semiconducteurs est d'avoir, au zéro degré absolu, une bande de valence pleine et une bande de conduction vide.

Le diagramme de la figure (II .5 .c), est en fait très schématique et doit être modifié pour tenir compte de la nature réelle du cristal. On obtient la structure de bandes du cristal en développant les fonctions d'onde électroniques sur la base des orbitales atomiques en tenant compte de deux propriétés primordiales de la structure cristalline : la *symétrie de la maille cristalline* et la *symétrie de translation du réseau*.

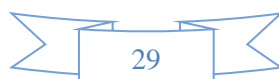
La première propriété nous amène à constater que dans les matériaux à structure cubique du type diamant ou zinc-blende (ZnS), chaque atome établit des liaisons identiques avec chacun de ses quatre voisins. On simplifiera donc l'écriture du problème en tenant compte de cette symétrie dans la construction des fonctions de base.

C'est la raison pour laquelle on développe les fonctions d'onde électroniques du cristal non pas

sur la base des orbitales  $s$  et  $p$  des différents atomes mais sur la base des orbitales de liaison qui résultent d'une hybridation  $sp^3$  des orbitales atomiques. Les orbitales atomiques et les orbitales de liaison sont des représentations équivalentes, mais les secondes tiennent compte de la symétrie de la maille élémentaire. La coordination étant tétraédrique, la base naturelle est une base de quatre orbitales de liaison dans lesquelles la densité de charge est maximum dans la direction des quatre plus proches voisins.

Les directions des quatre plus proches voisins sont les directions (111),  $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ ,  $(\bar{1}\bar{1}1)$  et  $(1\bar{1}\bar{1})$

de sorte que les orbitales de liaison résultant de l'hybridation  $sp^3$  des orbitales atomiques s'écrivent respectivement :



$$|h_1\rangle = \frac{1}{2} [|s\rangle + |p_x\rangle + |p_y\rangle + |p_z\rangle]$$

$$|h_2\rangle = \frac{1}{2} [|s\rangle + |p_x\rangle - |p_y\rangle - |p_z\rangle]$$

$$|h_3\rangle = \frac{1}{2} [|s\rangle - |p_x\rangle + |p_y\rangle - |p_z\rangle]$$

$$|h_4\rangle = \frac{1}{2} [|s\rangle - |p_x\rangle - |p_y\rangle + |p_z\rangle] \quad (\text{II.12.d})$$

L'indice 3 de l'écriture  $sp^3$  signifie que dans chacune des liaisons, l'électron passe 1/4 du temps sur l'état  $s$  et 3/4 du temps sur l'état  $p$ .

Pour chaque paire d'atomes voisins les orbitales hybrides se couplent pour donner naissance aux orbitales liantes et antiliantes avec 2 électrons par liaison (8 électrons pour les quatre liaisons du tétraèdre) qui vont se localiser sur les orbitales liantes. Ainsi pour chacune des liaisons on retrouve une situation analogue à la molécule d'hydrogène. Les orbitales liantes et antiliantes s'écrivent sous la forme de combinaisons linéaires des orbitales hybrides dans la direction des deux atomes considérés.

$$|\psi\rangle = C|h\rangle + C'|h'\rangle \quad (\text{II.13})$$

Comme pour la molécule d'hydrogène (Eq. II.8-9), les orbitales liantes et antiliantes et les niveaux d'énergie correspondants sont donnés par :

$$|\psi\rangle_l = \frac{1}{\sqrt{2}} [|h\rangle + |h'\rangle] \quad (\text{II.14.a})$$

$$|\psi\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{2}} [|h\rangle - |h'\rangle] \quad (\text{II.14.b})$$

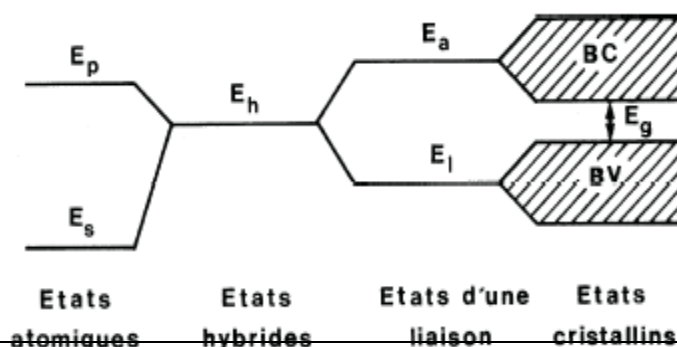
$$E_l = E_h + V_2 \quad (\text{II.15.a})$$

$$E_a = E_h - V_2 \quad (\text{II.15.b})$$

où  $E_h = (E_s + 3E_p)/4$  est l'énergie de l'état hybride, qui n'a rien de réel mais constitue une étape intermédiaire dans le calcul et  $V_2$  l'énergie de couplage entre les deux orbitales hybrides, c'est-à-dire l'élément de matrice

$$V_2 = \langle h|H|h'\rangle = \langle h'|H|h\rangle \quad (\text{II.16})$$

A ce stade du calcul les électrons dans le cristal disposent de deux niveaux d'énergie  $E_l$  et  $E_a$  chacun étant dégénéré deux fois pour chaque liaison, c'est-à-dire au total  $2N$  fois si  $N$  est le nombre d'atomes du cristal. Ces états d'énergie sont représentés sur la figure (II.6).



**Figure II.6 : Transformation des états atomiques en états cristallins**

$$|\psi_k^l(r)\rangle = \sum_i e^{ikr_i} |\psi_l(r - r_i)\rangle \quad (\text{II.17.a})$$

$$|\psi_k^a(r)\rangle = \sum_i e^{ikr_i} |\psi_a(r - r_i)\rangle \quad (\text{II.17.b})$$

où  $i$  est sommé sur le réseau de Bravais du cristal.

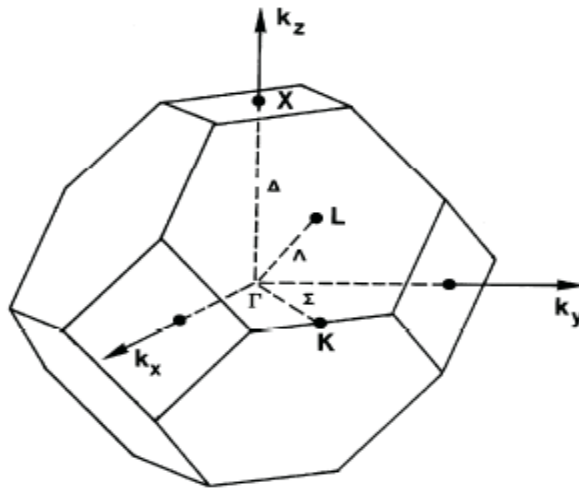
Les termes  $|\psi_l(r - r_i)\rangle$  représentent les orbitales liantes et antiliantes de la paire d'atomes d'abscisse  $r_i$  et  $k$  est un vecteur de l'espace réciproque du cristal. Ces fonctions sont appelées sommes de Bloch d'orbitales liantes et antiliantes.

Les niveaux d'énergie sont calculés par les éléments de matrice du type

$$E_k^l = \langle \psi_k^l(r) | H | \psi_k^l(r) \rangle / \langle \psi_k^l(r) | \psi_k^l(r) \rangle \quad (\text{II.18.a})$$

$$E_k^a = \langle \psi_k^a(r) | H | \psi_k^a(r) \rangle / \langle \psi_k^a(r) | \psi_k^a(r) \rangle \quad (\text{II.18.b})$$

Ces niveaux d'énergie traduisent respectivement les élargissements des niveaux  $E_l$  et  $E_a$  en bande de valence et de conduction. Cette évolution est schématisée sur la figure (II.6).



**Figure II.7 : Première zone de Brillouin d'un cristal cubique**

Point  $\Gamma$  : centre de zone

Directions  $\Delta$  : direction 100 et équivalentes

Directions  $\Lambda$  : direction 111 et équivalentes

Directions  $\Sigma$  : direction 110 et équivalentes

Points X : bord de zone dans la direction 100 et les directions équivalentes

Points L : bord de zone dans la direction 111 et les directions équivalentes

Points K : bord de zone dans la direction 110 et les directions équivalentes

## II.2.5. Calcul de la structure de bandes d'énergie

### II.2.5.1. Approximations de base

Un cristal est constitué d'un grand nombre de particules en interaction que sont les électrons et les noyaux, de sorte que le calcul des états d'énergie passe nécessairement par un certain nombre d'hypothèses.

#### II.2.5.1.a. Approximation de Born-Oppenheimer

L'Hamiltonien total du système s'écrit :

$$H = T_e + T_n + V_{ee} + V_{en} + V_{nn} \quad (\text{II.19})$$

où  $T_e$  et  $T_n$  sont les (opérateurs) énergies cinétiques des électrons et des noyaux, respectivement;  $V_{ee}$ ,  $V_{en}$  et  $V_{nn}$  sont les (opérateurs) énergies potentielles d'interaction électron-électron, électron noyau et noyau-noyau, respectivement.

La première approximation consiste à limiter les interactions entre particules au terme le plus

important que constitue l'interaction coulombienne. L'Hamiltonien du système s'écrit alors :

$$H = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_I \frac{\hbar^2}{2M_I} \nabla_I^2 + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} - \sum_{i < j} \frac{Z_I e^2}{|R_I - r_i|} + \sum_{I < J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|R_I - R_J|} \quad (\text{II.20})$$

où les indices  $i, j$  et  $I, J$  se rapportent respectivement aux électrons et aux noyaux, et  $Z$  représente la charge nucléaire.

Les états stationnaires d'énergie et les fonctions d'onde du système sont donnés par les solutions de l'équation de Schrödinger

$$H\psi(R, r) = E\psi(R, r) \quad (\text{II.21})$$

où  $R$  représente les coordonnées des noyaux et  $r$  celles des électrons.

Les électrons et les noyaux atomiques ont des masses très différentes de sorte que l'on peut utiliser l'approximation de Born-Oppenheimer pour séparer, comme dans l'étude de l'atome d'hydrogène, l'équation aux valeurs propres des noyaux de celle des électrons. Les états propres du système sont alors caractérisés par des fonctions d'onde produits d'une fonction d'onde électronique par une fonction d'onde nucléaire

$$(\text{II.22})$$



$$\psi(R, r) = \psi_n(R)\psi_e(R, r)$$

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$[T_e + T_n + V_{ee} + V_{en} + V_{nn}]\psi_n(R)\psi_e(R, r) = E\psi_n(R)\psi_e(R, r) \quad (\text{II .23})$$

et se ramène aux deux équations interdépendantes

$$[T_e + V_{ee} + V_{en}]\psi_e(R, r) = E_e(R)\psi_e(R, r) \quad (\text{II .24.a})$$

$$[T_n + V_{nn} + E_e(R)]\psi_n(R) = E\psi_n(R) \quad (\text{II .24.b})$$

Ces équations constituent les équations de base de ce que l'on appelle l'approximation adiabatique. La première donne l'énergie électronique pour une valeur déterminée R des coordonnées nucléaires. Cette énergie électronique apparaît ensuite comme contribution potentielle dans l'équation aux valeurs propres du mouvement des noyaux.

Pour étudier les états d'énergie électroniques du cristal on n'utilise que l'équation (II .24.a), les noyaux étant supposés fixes à leur position d'équilibre.

#### II.2.5.1.b. Méthode LCAO

La méthode LCAO (Linear Combinations of Atomic Orbitals), appelée aussi méthode des liaisons fortes, consiste à développer les fonctions d'onde du cristal sous forme de combinaisons linéaires d'orbitales atomiques, en tenant compte du théorème de Bloch auquel doivent satisfaire les fonctions d'onde du cristal. La fonction d'onde est écrite sous la forme d'une somme de Bloch d'orbitales atomiques.

C'est la méthode évoquée dans le paragraphe précède. Elle donne de bons résultats lorsque les orbitales atomiques sont très localisées autour des noyaux et changent peu lorsque les atomes sont rapprochés pour constituer le cristal. Ceci est vrai pour les états du cœur de l'atome mais l'est beaucoup moins pour les électrons de valence. En outre, en ce qui concerne les états de valence, la méthode est mieux adaptée au calcul des états associés aux combinaisons liantes, c'est-à-dire à la bande de valence, qu'aux états résultant des combinaisons antillantes, c'est-à-dire à la bande de conduction.

En résumé, cette méthode est bien adaptée au calcul des bandes profondes étroites, résultant de l'élargissement des états du cœur, un peu moins adaptée au calcul de la bande de valence et peu adaptée au calcul de la bande de conduction.

#### II.2.5.1.c. Méthode OPW

La méthode LCAO procède de l'idée que les états électroniques dans le cristal sont essentiellement des états atomiques, plus ou moins perturbés par la nature périodique du cristal. La méthode OPW (Orthogonalized Plane Waves) procède de l'idée diamétralement

opposée, que les états électroniques dans le cristal sont essentiellement les états de l'électron libre, plus ou moins perturbés par la nature périodique du cristal. Les fonctions d'onde des électrons dans le cristal sont alors développées sur la base des fonctions d'onde des électrons libres, c'est-à-dire d'ondes planes. Il en résulte que le domaine de validité de cette méthode est

complémentaire du domaine de validité de la méthode précédente.

Cette méthode est bien adaptée à l'étude de la bande de conduction, un peu moins à celle de la

Bande de valence et pas du tout à celle des états du cœur. De simples considérations physiques montrent que le développement de la fonction d'onde en ondes planes, sans autres considérations, pose d'importants problèmes de convergence. Plus les états sont localisés, plus le nombre d'ondes planes pour les décrire est important. A la limite, pour décrire les états du cœur, il faut un nombre infini d'ondes planes. On tourne la difficulté en calculant les bandes

Profondes issues des états du cœur par la méthode LCAO par exemple.

Les autres états du cristal, c'est-à-dire les états de valence et de conduction sont des états

Propres du cristal au même titre que les bandes profondes et par conséquent orthogonaux à ces états du cœur. Dans la mesure où la méthode OPW va servir à calculer uniquement les états de conduction et de valence, on utilise alors une base d'ondes planes constituée de combinaisons orthogonales aux états du cœur, d'où le nom d'ondes planes orthogonalités.

La méthode OPW a beaucoup été utilisée pour calculer les bandes de valence et de conduction des semiconducteurs de type IV-IV et III-V. La principale difficulté dans cette méthode est qu'elle nécessite la séparation entre les états du cœur d'une part, et les états de valence et de conduction de l'autre. Ceci suppose que les fonctions d'onde du cœur sont très localisées à l'intérieur de la cellule élémentaire et leurs niveaux d'énergie très séparés de ceux de la bande de valence.

Ces conditions sont mal remplies dans le cas de matériaux constitués d'atomes ayant des couches d incomplètes. Les énergies des états atomiques d ne sont en fait pas très différentes de celles des états s et p de même nombre quantique principal, de sorte que ces états peuvent difficilement être inclus dans les états de cœur.

### II.2.5.1. d. Méthode du pseudopotentiel

La méthode du pseudopotentiel, comme la méthode OPW, utilise les propriétés d'orthogonalité des états de valence et conduction avec les états du cœur. Mais dans le formalisme du pseudopotentiel l'effet de l'orthogonalité est inclus dans le potentiel sous la forme d'un potentiel équivalent appelé pseudopotentiel.

L'effet d'orthogonalisation aux états de cœur revient à extraire du potentiel cristallin la contribution rapidement variable de la région du cœur.

Points	Dégénérences	Axes
$\Gamma, (0, 0, 0)$	1	
$X, 2\pi/a(\pm 1, 0, 0), 2\pi/a(0, \pm 1, 0), 2\pi/a(0, 0, \pm 1),$	6	$\Delta, \langle 1, 0, 0 \rangle$
$L, 2\pi/a(\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2})$	8	$\Lambda, \langle 1, 1, 1 \rangle$
$K, 2\pi/a(\pm \frac{3}{4}, \pm \frac{3}{4}, 0), 2\pi/a(0, \pm \frac{3}{4}, \pm \frac{3}{4}), 2\pi/a(\pm \frac{3}{4}, 0, \pm \frac{3}{4})$	12	$\Sigma, \langle 1, 1, 0 \rangle$

Le pseudopotentiel  $V_p$  est alors lentement variable et se prête bien à une approche du problème en terme de perturbation.

**Tableau I.1 Zone Brillouin des réseaux cfc, diamant et zinblende: arêtes de zone et leurs axes correspondants (r est le centre)**

Les bandes d'énergie des solides ont été étudiées théoriquement en utilisant une variété de méthodes numériques. Pour les semi-conducteurs, les trois méthodes les plus fréquemment utilisées sont la méthode des ondes planes orthogonalisées, la méthode pseudopotentielle, et la méthode  $k \times p$ , la figure 4 montre les résultats des études des structures de bande d'énergie de Si et GaAs.

Notez que pour tout semi-conducteur, il existe une plage d'énergie interdite dont les états autorisés ne peuvent exister. Les régions énergétiques ou les bandes énergétiques sont autorisées au-dessus et au-dessous de cet écart d'énergie. Les bandes supérieures sont appelées les bandes de conduction ; les bandes inférieures, les bandes de valence.

Dans cette figure le bas de la bande de conduction est désigné  $E_c$ , et le haut de la bande de valence  $E_v$ . Dans les bandes, l'énergie électronique est classiquement définie comme étant positive lorsqu'elle est mesurée vers le haut à partir de  $E_v$ , et l'énergie du trou est positive lorsqu'elle est mesurée vers le bas de  $E_c$ .

La bande de valence dans la structure de zinblende, telle que celle du GaAs sur la figure (II.8.b), se compose de quatre sous-bandes lorsque le spin est négligé dans l'équation de Schrödinger, et chaque bande est doublée lorsque le spin est pris en compte. Trois des quatre groupes sont dégénérés en  $k = 0$  (point r) et forment le bord supérieur de la bande, et la quatrième bande forme le fond (non représenté). De plus, l'interaction spin-orbite provoque un clivage de la bande en  $k = 0$ .

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

Près des bords de bande, c'est-à-dire en bas de E et en haut de E, la relation E-k peut être approximé par une équation quadratique où  $m^*$  est la masse effective associée, le long d'une direction donnée, les deux bandes de valence supérieures peuvent être approximées par deux bandes paraboliques avec des courbures :  $\partial^2 E / \partial k^2$

La bande de trous lourds (la bande la plus large dans l'axe k avec le plus petit et la bande des trous de légers (la bande la plus étroite avec un plus grand) La masse effective générale est légers avec des composantes  $m_i$  définies comme  $\partial^2 E / \partial k^2$  et la bande des trous de légers (la bande la plus étroite avec un plus grand).

La masse effective générale est tensorielle avec des composantes  $m_i$  définies comme :

$$\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_i \partial k_j} \quad (\text{II.26})$$

Les porteurs de charge en mouvement sont également caractérisés par une vitesse de groupe  $v_g$  et par la quantité de mouvement  $P = \hbar k$ . La bande de conduction se compose d'un certain nombre de sous-bandes (Fig. II.8).

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \quad (\text{II.27})$$

Le bas du la bande de conduction peut apparaître au centre  $k = 0$  ( $\Gamma$ ) ou décentré le long de k axes différents.

Les considérations de symétrie à elles seules ne déterminent pas l'emplacement du bas de la bande de conduction. Les résultats expérimentaux montrent, cependant, que pour Si, il est décentré et le long de l'axe [1001 (A), et pour GaAs le bas du la bande de conduction est en  $k = 0$  ( $\Gamma$ ). C en considérant que le maximum de bande de valence  $E_v$  se produit à  $\Gamma$ , le minimum de bande de conduction peut être aligné ou désaligné dans l'espace k lors de la détermination de la bande interdite.

Il en résulte une bande interdite directe pour GaAs et bande interdite pour Si. Cela a des conséquences importantes lorsque le transfert des porteurs entre cet écart minimum) est conservé pour la bande interdite directe mais changé pour la bande interdite indirecte.

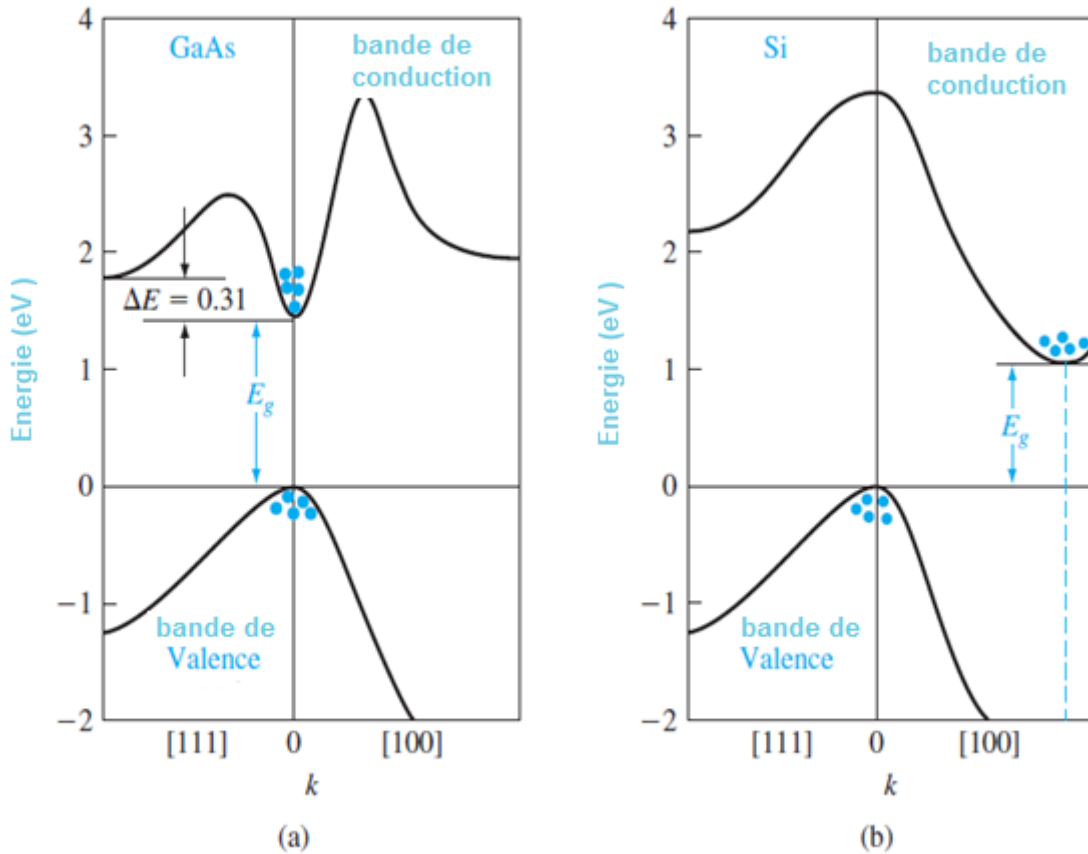


Figure. II.8 Structures de bande d'énergie de (a) Si et (b) GaAs, où  $E_g$  est la bande interdite d'énergie. Plus les signes (+) indiquent des trous dans les bandes de valence et les signes moins (-) indiquent les électrons dans la bande de conduction.

### II.2.6 Semiconducteurs univallée et multivallée

Les différents types de structure de bande sont représentés sur la figure (II.9), suivant les directions de plus haute symétrie de l'espace réciproque, c'est-à-dire suivant les directions  $\Delta$  (001) et  $\Lambda$  (111).

La bande interdite est grisée, les bandes supérieures sont les bandes de conduction, les bandes inférieures sont les bandes de valence. Au zéro degré absolu la bande de valence est pleine d'électrons, la bande de conduction est vide.

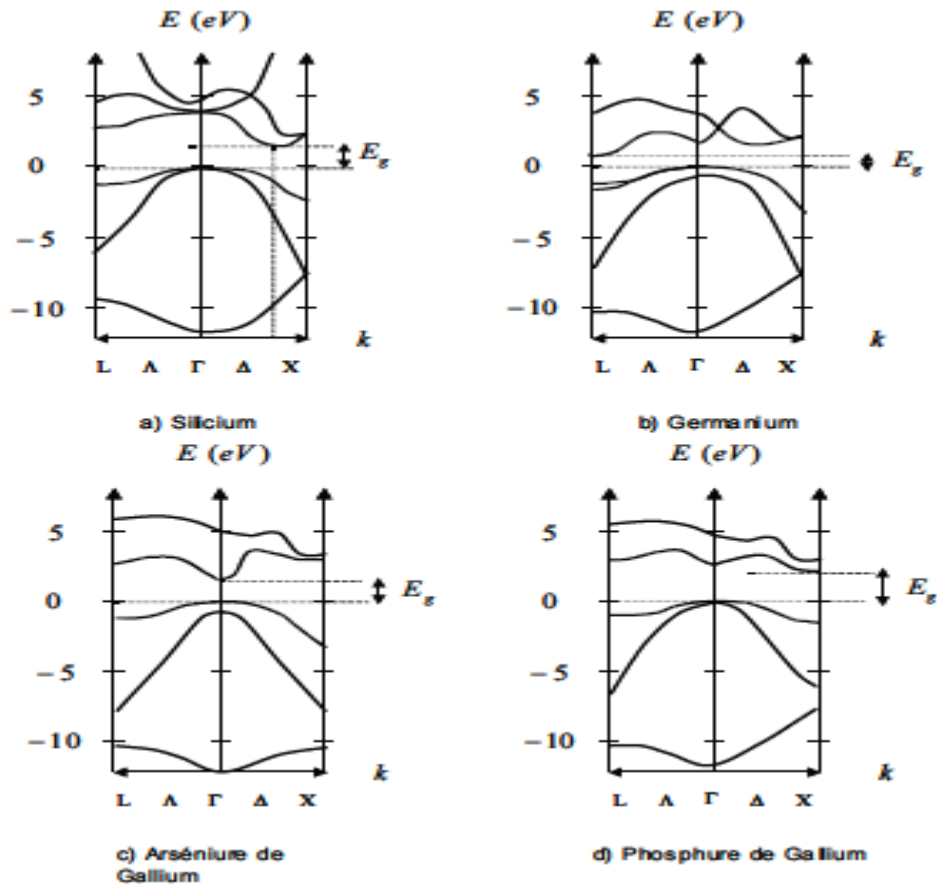
A la température ambiante, à laquelle fonctionnent la plupart des composants électroniques, certains électrons sont thermiquement excités depuis la bande de valence et occupent la bande de conduction. Il est évident que les électrons les plus susceptibles de passer de la bande de valence vers la bande de conduction sont les électrons de la bande de valence supérieure.

En outre, ces électrons occuperont la bande de conduction inférieure. De plus, parmi les états de ces bandes, ceux qui jouent le rôle essentiel sont respectivement ceux du sommet de la bande de valence et du minimum de la bande de conduction.

Considérons tout d'abord le sommet de la bande de valence, il est caractérisé par deux propriétés essentielles. Il est situé au centre de la zone de Brillouin, c'est à-dire en  $k = 0$ , ce point est appelé point  $\Gamma$ . Ce maximum est constitué de la convergence de deux bandes qui sont dégénérées au sommet.

Ces deux propriétés sont communes à tous les semiconducteurs à structure cubique. Compte tenu de l'unicité du point  $\Gamma$  dans la première zone de Brillouin, le maximum de la bande de valence est unique.

Considérons maintenant le minimum de la bande de conduction, la figure (II.10) montre que la situation n'est pas unique.



*Figure II.9 : Structures de bandes du silicium, du Germanium du Phosphure de Gallium et de l'Arséniure de Gallium dans les directions de haute symétrie*

**Cas du silicium :** le minimum de la bande de conduction est situé dans la direction (001) appelée direction  $\Delta$ , au point d'abscisse  $((00K_0))$  avec  $K_0 = 0.85K_X$  où  $K_0$  représente l'abscisse

du point X, limite de la première zone de Brillouin dans la direction  $\Delta$ . Compte tenu de la structure cubique du silicium, il existe 6 directions équivalentes qui sont  $(100)$ ,  $(\bar{1}00)$ ,  $(010)$ ,  $(0\bar{1}0)$ ,  $(001)$  et  $(00\bar{1})$  ( $100$ )

La bande de conduction présente donc six minima équivalents, on dit que le silicium est un semiconducteur multivallée à 6 vallées  $\Delta$ . La variation  $E(k)$  de l'énergie de la bande de conduction au voisinage du minimum n'est pas isotrope, elle est plus rapide dans le plan perpendiculaire à l'axe considéré que suivant cet axe. Les surfaces d'énergie constante sont des ellipsoïdes de révolution autour de chacun des axes équivalents. Ces ellipsoïdes sont schématisés sur la figure (II.10). Le cas du silicium est unique sur l'ensemble des semiconducteurs utilisés dans les composants électroniques.

**Cas du germanium** : le minimum de la bande de conduction est situé dans la direction  $(111)$  appelée direction  $\Lambda$ , à l'extrémité de la zone de Brillouin au point appelé point L. Il existe 8 directions  $\Lambda$  équivalentes, les  $(\pm\pm\pm)$  directions.

Dans la mesure où le minimum est situé en bord de zone de Brillouin, les surfaces d'énergie constante sont 8 demi-ellipsoïdes de révolution autour de chacun des  $(\pm\pm\pm)$  axes

Les points extrêmes de la zone de Brillouin étant équivalents, on peut représenter

ces 8 demi-ellipsoïdes par 4 ellipsoïdes centrés respectivement aux points  $t(111)$ ,  $(\bar{1}\bar{1}1)$ ,  $(1\bar{1}\bar{1})$  et  $(11\bar{1})$ . On dit que le germanium est un semiconducteur multivallée à 4 vallées L. Au même titre que le silicium est le seul semiconducteur à 6 vallées  $\Delta$ , le germanium est le seul semiconducteur à 4 vallées L (Fig. II.10).

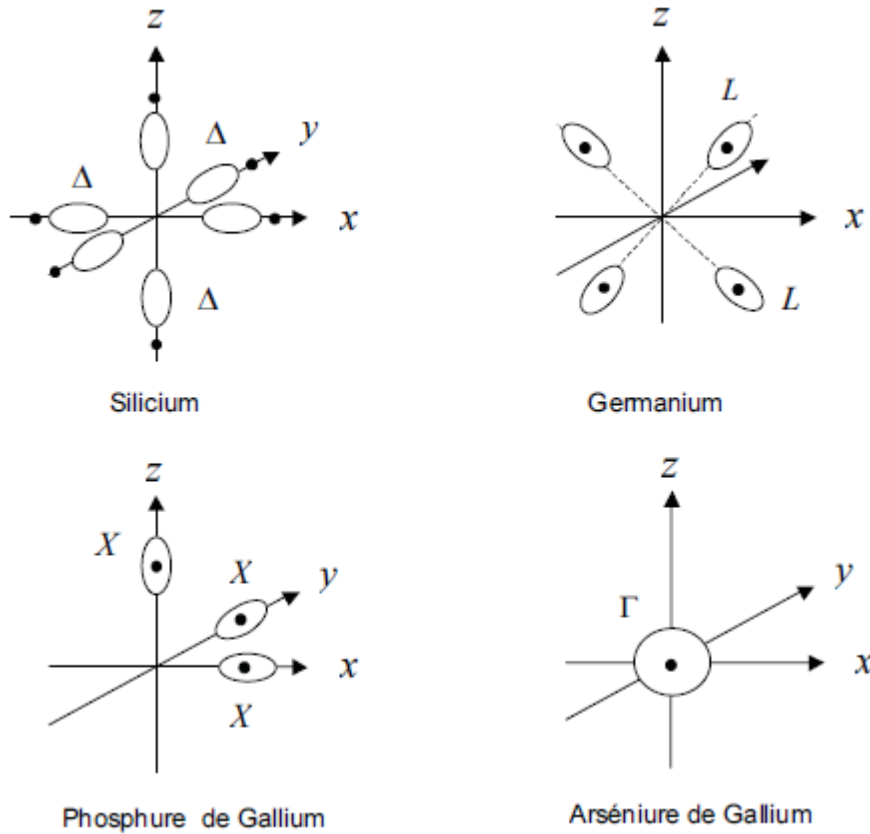
**Cas du GaAs** : Le minimum de la bande de conduction est situé en  $k = 0$  au point  $\Gamma$ . Il est par conséquent unique. Les surfaces d'énergie constante au voisinage du minimum sont des sphères centrées au point  $\Gamma$ . On dit que le GaAs est un semiconducteur univallée.

**Cas du GaP** : Le GaP est un composé III-V, sa bande de conduction présente 6 minima aux points X, c'est-à-dire en bord de zone dans les directions  $\Delta$ . Les surfaces d'énergie constante sont constituées de 6 demi-ellipsoïdes que l'on peut ramener à trois ellipsoïdes pour les mêmes raisons que le germanium. On dit que le GaP est un semiconducteur multivallée à 3 vallées X. Les composés III-V AlP, AlAs et AlSb ont une bande de conduction de ce type (Fig. II.10).

La figure II.10 montre les formes des surfaces à énergie constante. Pour *Si* il y a six ellipsoïdes le long des (100) axes, avec les centres des ellipsoïdes situés à environ aux trois quarts de la distance du centre de la zone Brillouin.

Pour *GaAs* la surface d'énergie est une sphère au centre de la zone. En adaptant les résultats expérimentaux à la parabolique bandes, on obtient les masses effectives d'électrons; un pour *GaAs* et deux pour *Si*,  $m_l$  le long des axes de symétrie et  $m_t$  transversalement aux axes de symétrie.

À température ambiante et à pression atmosphérique normale, les valeurs de la bande interdite est de 1,12 eV pour *Si* et 1,42 eV pour *GaAs*. Ces valeurs sont pour une pureté élevée des matériaux. Pour les matériaux fortement dopés, les bandes interdites deviennent plus petites. Les résultats expérimentaux montrent que les bandes interdites de la plupart des semi-conducteurs diminuent avec l'augmentation de la température



**Figure II.10 : Représentation schématique des surfaces d'énergie constante des bandes de conduction de *Si*, *Ge*, *GaP*, *GaAs***

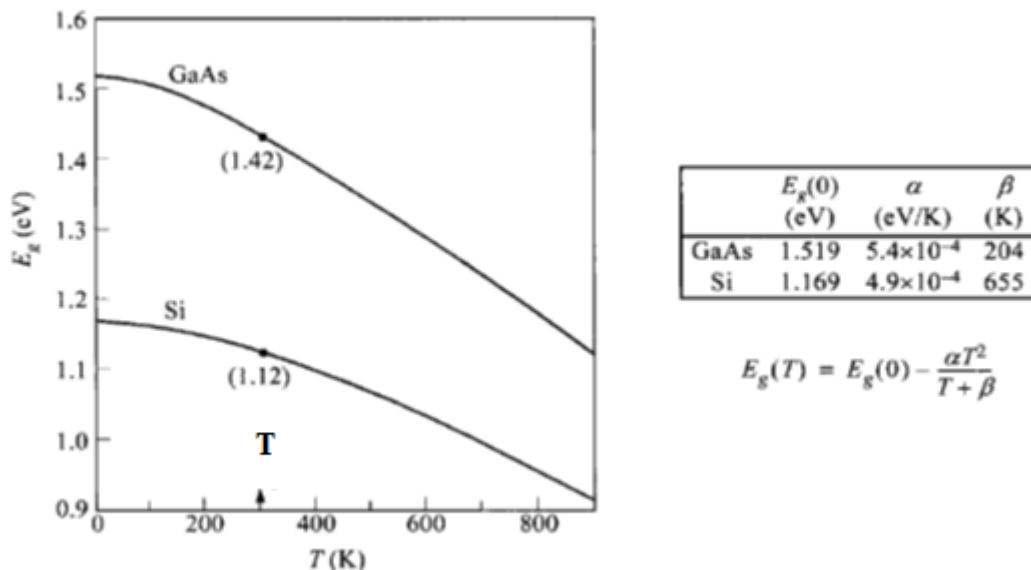
La figure II.11 montre les variations des bandes interdites en fonction de la température pour *Si* et *GaAs*. La bande interdite approche respectivement 1,17 et 1,52 eV pour ces deux



semi- conducteurs à  $T = 0 K$ . La variation des bandes interdites avec la température peut être exprimée environ par une fonction universelle :

$$E_g(T) \approx E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta}$$

où  $E_g(0)$ ,  $\alpha$  et  $\beta$  sont donnés dans l'encart de la Fig. II.9. Le coefficient de température  $dE_g/dT$  est négatif pour les deux semi-conducteurs. Certains semi-conducteurs ont des  $dE_g/dT$  , par exemple, la bande interdite du PbS (passe de 0,286 eV à 0 K à 0,41 eV à 300 K . Près de la température ambiante, la bande interdite de GaAs augmente avec la pression P, et  $dE_g/dP$  est d'environ  $12.6 \times 10 \text{ eV}\cdot\text{cm}^2 / N$ , tandis que la bande interdite Si diminue avec la pression, avec  $dE/dP = -2.4 \text{ eV}\cdot\text{cm}^2 / N$ .



*Figure. II.11 Bandes interdites d'énergie de Si et de GaAs en fonction de la température.*

## II.2 Notion de trou

Lorsque la température est différente de zéro, un certain nombre d'électrons de la bande de valence sont excités dans la bande de conduction. Compte tenu de la nature antiliante des fonctions d'onde électroniques dans la bande de conduction, ces électrons sont des particules quasilibres dans le semiconducteur.

### II.2 .1 Concept de masse effective

Un électron dans la bande de conduction est caractérisé par une fonction d'onde qui est une somme de Bloch d'orbitales antiliantes. En termes corpusculaires, c'est une particule dans un potentiel cristallin.

On représente cette particule quasi-libre de charge  $-e$  et de masse  $m_0$ , par une quasi-particule libre de charge  $-e$  et de masse  $m_e$  qu'on appelle masse effective de l'électron.

Cette représentation est loin d'être évidente et sa justification peut se trouver dans un certain nombre d'ouvrages théoriques.

Une description plus précise de la conduction conduit à représenter les états comme les états de pseudo particules (électrons et trous) au voisinage du niveau de Fermi.

Considérons un cristal soumis à une différence de potentiel. Un électron de conduction du cristal est soumis d'une part à une force interne  $\vec{F}_l$  résultant du champ cristallin, et d'autre part à une force d'origine externe  $\vec{F}_e$  résultant du champ électrique appliqué au cristal. L'équation de la dynamique s'écrit pour cet électron :

$$m_0 \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F}_l + \vec{F}_e \quad (\text{II .29})$$

On écrit que l'électron dans le cristal répond à la sollicitation de la force externe  $F_e$ , comme une quasi-particule de masse  $m_e$  dans le vide :

$$m_e \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F}_e \quad (\text{II .30})$$

La masse effective contient l'effet global du potentiel cristallin sur l'électron,. Dans le réseau cristallin les fonctions propres électroniques sont des ondes de Bloch de la forme :

$$\psi(r, t) = u(r)e^{ik.r} e^{-iw_k t}$$

avec  $E_k = \hbar w_k$  (II .31)

L'électron dans un état  $k$  est représenté par un paquet d'onde centré sur la pulsation  $w_k$ . La vitesse de cet électron est égale à la vitesse de groupe du paquet d'ondes.

$$v = \frac{dw}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \quad (\text{II .32})$$

L'accélération de cet électron est alors donnée par :

$$\gamma = \frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \frac{dE}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \frac{1}{dt}$$

En mécanique classique, si une particule est soumise à une force  $F$  pendant un intervalle de temps  $dt$ , la variation de son énergie cinétique est donnée par :

$$dE = F \cdot v dt \quad \text{ou} \quad \frac{dE}{dt} = F \cdot v \quad (\text{II .34})$$

En portant l'expression (II .34) dans l'expression de l'accélération on obtient compte tenu de (II .32) :

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dk} (F \cdot v) = F \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2E}{dk^2} \quad (\text{II .35})$$

ce qui s'écrit  $F = m_e \gamma$  avec :

$$m_e = \frac{\hbar^2}{d^2E/dk^2} \quad (\text{II .36})$$

La masse effective des électrons apparaît donc comme inversement proportionnelle à la dérivée seconde de la courbe de dispersion  $E(k)$ , c'est-à-dire à la courbure des bandes d'énergie dans l'espace des  $k$ .

Au voisinage d'un minimum de la bande de conduction, c'est-à-dire dans la région du diagramme énergétique où sont localisés les électrons de conduction, on peut développer la fonction  $E(k)$  en série de Taylor.

Dans la mesure où il s'agit d'un minimum, la dérivée première est nulle, de sorte qu'en limitant le développement au deuxième ordre, l'énergie s'écrit :

$$E(k) = E(k_0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} (k_x - k_{0x})^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} (k_y - k_{0y})^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} (k_z - k_{0z})^2 \quad (\text{II .37})$$

Les surfaces d'énergie constante dans l'espace des  $k$ , sont définies par la condition  $E(k) = cte$ , c'est-à-dire à partir de (II .37) par l'équation :

$$\frac{(k_x - k_{0x})^2}{A_x} + \frac{(k_y - k_{0y})^2}{A_y} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{A_z} = 1 \quad (\text{II .38})$$

Avec

$$A_i = \frac{[E(k) - E(k_0)]}{\left[ \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i^2} \right]} \quad i = x, y, z \quad (\text{II .39})$$

Ces surfaces sont par conséquent des quadriques, dont la forme dépend des signes et des valeurs relatives des coefficients  $A_x, A_y, A_z$

Dans la mesure où il s'agit d'un minimum, l'énergie augmente dans chacune des directions de l'espace des  $k$ , de sorte que tous les coefficients sont positifs.

Il en résulte que les surfaces d'énergie constante sont des ellipsoïdes. Si deux coefficients sont égaux, les ellipsoïdes sont de révolution, si les trois coefficients sont égaux les surfaces sont des sphères.

Considérons tout d'abord le cas d'un semiconducteur à gap direct. Pour simplifier on se place dans un espace à une dimension.

La bande de conduction est univallée, centrée en  $k_0 = 0$  et isotrope au voisinage de  $k_0$ . Tous les coefficients  $A_i$  sont égaux, de sorte que si on appelle  $E_c$  l'énergie du minimum, l'expression (II .37) s'écrit :

$$E(k) = E_c + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} (k)^2 \quad (\text{II .40})$$

Ou, compte tenu de la définition de la masse effective (Eq. II .36) :

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_e} \quad (\text{II .41})$$

Ainsi l'électron au voisinage du minimum de la bande de conduction se comporte comme un électron libre de masse  $m_e$ .

Comme l'énergie est un minimum local par rapport au vecteur d'onde, la vitesse de groupe de la particule classique associée y est nulle et donc son énergie cinétique.

Dans la mesure où la courbure de la bande de conduction varie peu au voisinage du minimum, la masse effective est constante et par suite l'énergie  $E(k)$  varie quadratiquement avec le vecteur d'onde  $k$ . Cette loi de variation constitue ce que l'on appelle l'approximation des bandes paraboliques.

Lorsque l'énergie cinétique des électrons devient très importante l'électron s'éloigne de  $E_c$  dans l'espace des énergies, sa masse effective varie, et l'approximation parabolique n'est plus justifiée.

On peut montrer que la variation de courbure des bandes est d'autant plus importante que le gap du matériau est petit. Il en résulte que l'approximation des bandes paraboliques est d'autant plus justifiée que le gap du semiconducteur est grand.

Revenons maintenant au cas réel à trois dimensions. Si le semiconducteur est à gap indirect, la bande de conduction est multivallée et anisotrope, avec plusieurs minima équivalents situés en différents points de la zone de Brillouin.

Considérons l'un quelconque de ces minima, centré en  $k_0 \neq 0$ . Les surfaces d'énergie constante au voisinage de  $k_0$  sont des ellipsoïdes qui, pour des raisons de symétrie, sont de révolution autour de l'axe portant le point  $k_0$ .

Dans la mesure où l'on se place dans le système d'axes principaux de l'ellipsoïde, l'axe z portant le point  $k_0$ , les coefficients  $A_i$  sont tels que  $A_x = A_y, \neq A_z$ .

L'expression (II .36) s'écrit alors :

$$E(k) = E_c + \frac{1}{2\partial k_{//}^2} (k_{//} - k_0)^2 + \frac{1}{2\partial k_{\perp}^2} k_{\perp}^2 \quad (\text{II .42})$$

où  $k_{//} = k_z$  :est la composante de k portée par l'axe de révolution de l'ellipsoïde, et  $k_{\perp} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$  est la composante de k dans le plan perpendiculaire.

Compte tenu de la définition de la masse effective (Eq. II .36), on pose :

$$m_l = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k_{//}^2} \quad (\text{II .43.a})$$

$$m_t = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k_{\perp}^2} \quad (\text{II .43.b})$$

$m_l$ :est la masse effective de l'électron dans son mouvement suivant l'axe de révolution de l'ellipsoïde, c'est-à-dire suivant l'axe portant le point  $k_0$  où se situe le minimum considéré.

$m_t$ : est la masse effective de l'électron dans son mouvement dans le plan perpendiculaire à cet axe.

$m_l$ : est appelée *masse effective longitudinale*,  $m_t$  est appelée *masse effective transverse*.

L'expression (II .42) s'écrit alors :

$$E(k) = E_c + \frac{1}{2m_l} (k_{//} - k_0)^2 + \frac{1}{2m_t} k_{\perp}^2 \quad (\text{II .44})$$

Pour des raisons fondamentales liées aux couplages interatomiques, le gap du matériau et la courbure de la bande de conduction en centre de zone sont directement liés.

Lorsque le gap augmente la courbure de la bande diminue et par suite la masse effective des électrons augmente. La figure (II.5) représente la tendance générale de cette variation pour les semiconducteurs à gap direct.

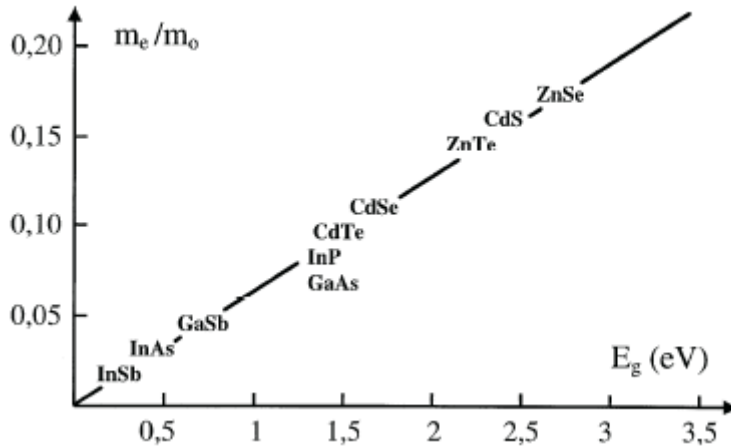


Figure II.11 : Allure de la masse effective des électrons pour les semiconducteurs à gap direct

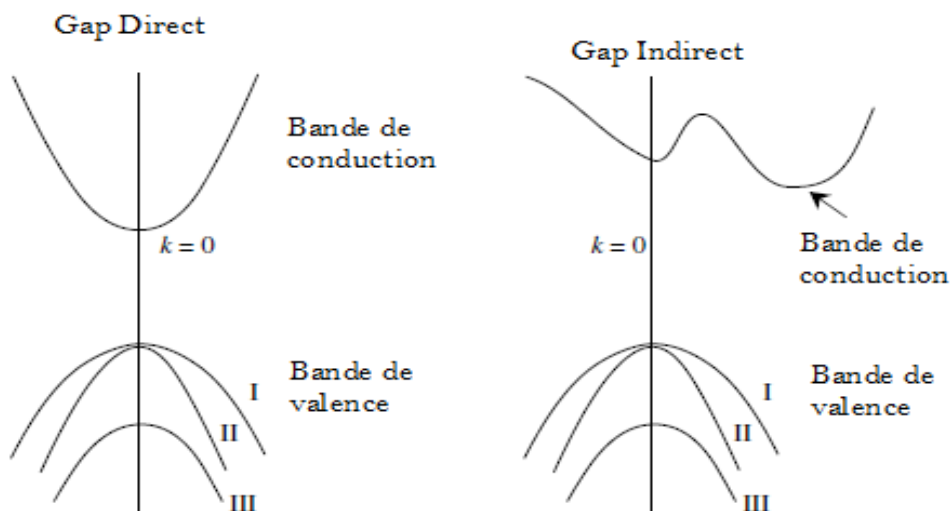
### II.2.1.1. Masse effective des trous

Considérons les trous de la bande de valence, leur masse effective est définie comme pour les électrons, par l'inverse de la dérivée seconde de la courbe de dispersion. Mais la bande de valence des semiconducteurs cubiques est, composée de deux branches dégénérées en  $k = 0$ . Cette structure est dilatée sur la figure (II.11).

La figure (II.11-a) représente les courbes de dispersion au voisinage de  $k = 0$ , les énergies des trous sont comptées positivement vers le bas. La bande de plus grande courbure, bande inférieure, correspond à des trous de masse effective inférieure.

On appelle ces trous des trous légers  $l_h$  (light holes), et la bande correspondante, bande de trous légers.

La bande de plus faible courbure, bande supérieure, est appelée bande trous lourds  $h_h$  (heavy holes).



- I Trous lourds  $h_h$
- II Trous légers  $l_h$
- III Bande séparée

*Fig II.12 Trous lourds et trous légers*

Il existe donc au voisinage du sommet de la bande de valence deux types de trous dont les énergies en fonction du vecteur d'onde sont données par des expressions plus compliquées que dans le cas des électrons.

$$E(k) = E_v + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ Ak^2 \mp \sqrt{B^2K^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_z^2k_x^2)} \right] \quad (\text{II.45})$$

Ces expressions sont de la forme où le signe + correspond aux trous légers et le signe - aux trous lourds.

On peut néanmoins, avec une approximation satisfaisante, remplacer les surfaces réelles par les sphères représentées en pointillés sur la figure (II.12).

Dans ce cas on définit des masses effectives isotropes pour les trous lourds et les trous légers.

En posant :  $\gamma_1 = 1$     $\gamma_1 = B/2$     $\gamma_1 = \frac{1}{2\sqrt{3}}\sqrt{C^2 + 3B^2}$     $\bar{\gamma} = \sqrt{2\gamma_2^2 + \gamma_3^2}$

Les masses effectives des trous lourds et légers sont données par :

$$m_{hh} = \frac{m_0}{\gamma_1 - \bar{\gamma}} \quad (\text{II.46.a})$$

$$m_{lh} = \frac{m_0}{\gamma_1 + \bar{\gamma}} \quad (\text{II.46.b})$$

Les paramètres  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  : , sont appelés paramètres de bandes de valence du semiconducteur. Leurs valeurs ont été calculées pour tous les semiconducteurs cubiques et mesurées pour la plupart d'entre eux.

On peut alors développer les bandes de valence dans l'approximation parabolique par des lois semblables à celles utilisées pour la bande de conduction.

En comptant l'énergie positivement vers le bas, ces lois s'écrivent :

$$(\text{II.47.a})$$

$$E_{hh}(k) = E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}}$$

$$E_{lh}(k) = E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{lh}}$$

Comme les électrons dans la bande de conduction, les trous dans les bandes de valence se comportent comme des **quasi** particules libres de masses respectives  $m_{hh}$  et  $m_{lh}$ .

Les masses effectives des électrons, les paramètres de bandes de valence et les masses effectives des trous sont portés dans le tableau (II-2) pour la plupart des semiconducteurs IV-IV, III-V et II-V.

**Tableau II.2. : Masses effectives des électrons et des trous aux extrema des bandes.  
Paramètres caractéristiques de la bande de valence**

Semi conducteur	Masses effectives des électrons $m_e / m_0$		Paramètres de la bande de valence			Masses effectives des trous $m_h / m_0$	
	$m_1 / m_0$	$m_2 / m_0$	$\gamma_1$	$\gamma_2$	$\gamma_3$	$m_{hh} / m_0$	$m_{lh} / m_0$
C (Diamant)	1,4	0,36	-	-	-	2,18	0,7
Si	0,916	0,191	4,22	0,39	1,44	0,53	0,16
Ge	1,588	0,082	13,35	4,25	5,69	0,35	0,043
SiC	0,3 $\mu$ c	0,4 $\mu$ c	-	-	-	0,84	0,79
AlN	0,3	-	-	-	-	1	0,47
AlP	3	0,2	3,47	0,06	1,15	0,63	0,20
AlAs	1,1	0,19	4,04	0,78	1,57	0,76	0,15
AlSb	1,61	0,23	4,15	1,01	1,75	0,94	0,14
GaN	0,2	-	-	-	-	0,8	0,26
GaP	1,1	0,22	4,20	0,98	1,66	0,79	0,14
GaAs	0,067		7,65	2,41	3,28	0,62	0,074
GaSb	0,043		11,8	4,03	5,26	0,49	0,046
InN	0,1		-	-	-	0,5	-
InP	0,073		6,28	2,08	2,76	0,85	0,089
InAs	0,023		19,67	8,37	9,29	0,60	0,027
InSb	0,012		35,08	15,64	16,91	0,47	0,015
ZnO	0,24		-	-	-	2,27	0,79
ZnS	0,28		2,54	0,75	1,09	1,76	0,23
ZnSe	0,17		3,77	1,24	1,67	1,44	0,149
ZnTe	0,15		3,74	1,07	1,64	1,27	0,154
CdS	0,16		-	-	-	5,0	0,70
CdSe	0,11		-	-	-	2,5	0,45
CdTe	0,09		5,29	1,89	2,46	1,38	0,103
HgS	-		-41,28	-21,0	-20,73	2,78	-0,012
HgSe	0,019		-25,96	-13,69	-13,20	1,36	-0,019
HgTe	0,027		-18,68	-10,19	-9,56	1,12	-0,026



**Chapitre III : Statistique des semi-conducteurs homogènes**

Pour déterminer le comportement statistique des particules, nous devons considérer les lois auxquelles les particules obéissent. Il existe trois lois de distribution déterminant la distribution de particules parmi les états énergétiques disponibles.

La loi de distribution classique est reliée par la fonction de probabilité de Maxwell – Boltzmann. Dans ce cas, on considère que les particules se distinguent en étant numérotées, par exemple, de 1 à N, sans limite au nombre de particules autorisées dans chaque état d'énergie.

Le comportement de molécules de gaz dans un récipient à assez basse pression est un exemple de cette distribution.

Une deuxième loi de distribution est la distribution de Bose – Einstein. Les particules dans ce cas sont indiscernables et, encore une fois, il n'y a pas de limite au nombre de particules autorisées dans chaque état quantique. Le comportement des photons, ou rayonnement du corps noir, est un exemple de cette loi.

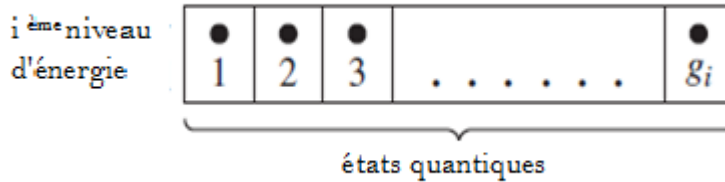
La troisième loi de distribution est la distribution de Fermi – Dirac. Dans ce cas, les particules sont à nouveau indiscernables, mais maintenant une seule particule est autorisée dans chaque état quantique. Les électrons dans un cristal obéissent à cette loi. Dans chaque cas, les particules sont supposées ne pas interagir.

### III.1 Fonction de probabilité de Fermi – Dirac

La figure III.1 montre le  $i^{\text{ème}}$  niveau d'énergie avec  $g_i$  états quantiques. Au maximum une particule est autorisée dans chaque état quantique par le principe d'exclusion de Pauli. Dans ce cas il y a  $g_i$  façons de choisir où placer la première particule,  $(g_i - 1)$  façons de choisir où placer la deuxième particule,  $(g_i - 2)$  façons de choisir où placer la troisième particule, et ainsi de suite.

$$(g_i)(g_i - 1) \dots (g_i - (N_i - 1)) = \frac{g_i!}{(g_i - N_i)!}$$

Puis le nombre total de façons d'arranger  $N_i$  particules dans le  $i^{\text{ème}}$  niveau d'énergie (où :  $(N_i \leq g_i)$ ) est :



*Figure III.1 Le  $i^{\text{ème}}$  niveau d'énergie avec  $g_i$  états quantiques.*

Cette expression inclut toutes les permutations des  $N_i$  particules entre elles.

Cependant, comme les particules sont indiscernables, le  $N_i!$  nombre de permutations que les particules ont entre elles dans un arrangement donné ne peut compter comme des arrangements séparés. L'échange de deux électrons quelconques, par exemple, ne produit pas de nouvel arrangement. Par conséquent, le nombre réel de moyens de réaliser une distribution de  $N_i$  particules dans le  $i^{\text{ème}}$  niveau est :

$$W_i = \frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!} \tag{ III .2 }$$

L'équation (III.1) donne le nombre de manières indépendantes de réaliser une distribution de  $N_i$  particules au  $i^{\text{ème}}$  niveau. Le nombre total de manières d'arranger  $(N_1, N_2, N_3, \dots, N_n)$  les particules indiscernables parmi  $n$  niveaux d'énergie sont le produit de toutes les distributions, ou encore:

$$W = \prod_{i=1}^n \frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!} \tag{ III .3 }$$

Le paramètre  $W$  est le nombre total de façons dont  $N$  électrons peuvent être disposés dans ce système, où  $N = \sum_{i=1}^n N_i$  est le nombre total d'électrons dans le système. Nous voulons trouver la distribution la plus probable, ce qui signifie que nous voulons trouver le maximum  $W$ . Le maximum  $W$  est obtenu en faisant varier  $N_i$  parmi les niveaux  $E_i$ , ce qui varie la distribution, mais en même temps, on conservera le nombre total de particules et constante l'énergie totale.

on obtient l'état macroscopique le plus probable en écrivant que  $W$  est maximum compte tenu des conditions  $N = \sum_{i=1}^n N_i$

$$\text{Ln}W = \sum_i \text{Ln}g_i! - \text{Ln}n_i! - \text{Ln}(g_i - n_i)! \quad (\text{III.4})$$

Ou en utilisant la formule de Stirling

$$\text{Ln}W = \sum_i \llbracket g_i \text{Ln}g_i - n_i \ln n_i - (g_i - n_i) \text{Ln}(g_i - n_i) \rrbracket \quad (\text{III.5})$$

La différentielle de  $\text{Ln}W$  s'écrit

$$d(\text{Ln}W) = \sum_i dn_i \text{Ln} \frac{(g_i - n_i)}{n_i} \quad (\text{III.6})$$

En utilisant la méthode des multiplicateurs de Lagrange, la répartition la plus probable est donnée par

$$\sum_i dn_i \left( \text{Ln} \frac{(g_i - n_i)}{n_i} \alpha - \beta E_i \right) = 0 \quad (\text{III.7})$$

Ainsi le nombre de particules  $n_i$  occupant un niveau d'énergie  $E_i$  est donné par

$$\text{Ln} \frac{(g_i - n_i)}{n_i} \alpha - \beta E_i = 0 \quad (\text{III.8})$$

La probabilité pour qu'une particule soit dans l'état d'énergie  $E_i$  est par conséquent donnée par le rapport  $n_i/g$

$$\frac{N(E)}{g(E)} = f_F(E) = \frac{1}{1 + \exp(\alpha + \beta E_i)} \quad (\text{III.9})$$

Avec  $\alpha = -\frac{E_F}{k_B T}$  et  $\beta = \frac{1}{k_B T}$

$n_i$ : est le nombre d'électrons dans le niveau d'énergie

$g_i$ : le nombre d'états quantiques dans le niveau d'énergie

On peut écrire la fonction de distribution la plus probable comme :

$$f_F(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)} \quad (\text{III.10})$$

La densité numérique  $N(E)$  est le nombre de particules par unité de volume par unité d'énergie et la fonction  $g(E)$  est le nombre d'états quantiques par unité de volume par unité d'énergie.

La fonction  $f_F(E)$  est appelée distribution de Fermi – Dirac ou fonction de probabilité et donne la probabilité qu'un état quantique à l'énergie  $E$  soit occupé par un électron.

L'énergie  $E_F$  est appelée énergie de Fermi. Une autre interprétation de la fonction de distribution est que  $f_F(E)$  est le rapport entre les états quantiques remplis et totaux à toute énergie  $E$ .

### III.2 Fonction de distribution et l'énergie de Fermi

Pour commencer à comprendre la signification de la fonction de distribution et du niveau d'énergie de Fermi, nous pouvons tracer la fonction de distribution en fonction de l'énergie. Soit  $T = 0$  K et considérons le cas où  $E < E_F$ . Le terme exponentiel dans l'équation (III .4) devient  $\exp [(E - E_F) / k_B T] \rightarrow \exp (-\infty) = 0$ .

La fonction de distribution résultante est :  $f_F (E < E_F) = 1$ .

Soit à nouveau  $T = 0$  K et considérons le cas où  $E_V > E_F$  Le terme exponentiel dans la fonction de distribution devient  $\exp [(E - E_F) / k_B T] \rightarrow \exp (+\infty) \rightarrow +\infty$ .

La résultante du fonction de distribution de Fermi – Dirac devient maintenant  $f_F (E > E_F) = 0$ .

La figure (III.3) montre les niveaux d'énergie discrets d'un système particulier ainsi que nombre d'états quantiques disponibles à chaque énergie. Si nous supposons, pour ce cas, que le système contient 13 électrons, alors la figure (III 3) montre comment ces électrons sont répartis entre les différents états quantiques à  $T = 0$  K.

Les électrons seront dans l'état d'énergie le plus bas possible, donc la probabilité qu'un état quantique soit occupé dans les niveaux d'énergie  $E_1$  à  $E_4$  est l'unité et la probabilité d'un état quantique occupé dans le niveau d'énergie  $E_5$  est nul.

L'énergie de Fermi, dans ce cas, doit être supérieure à  $E_4$  mais inférieure à  $E_5$ . L'énergie de Fermi ne doit pas nécessairement correspondre à un niveau d'énergie autorisé.

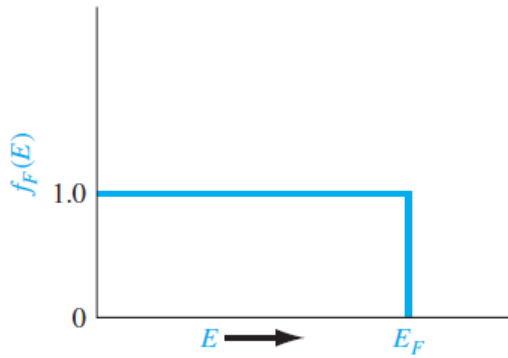


Figure III.2 La probabilité de Fermi fonction de l'énergie pour  $T = 0\text{ K}$ .

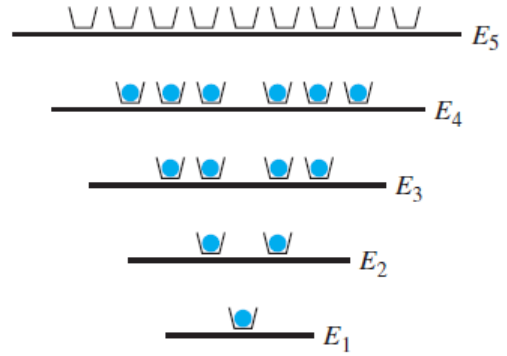


Figure III.3 États d'énergie discrets et fonction en états quantiques pour un système à  $T = 0\text{ K}$ .

La figure (III.4) montre les mêmes niveaux d'énergie discrets et états quantiques comme dans la figure III.3. La distribution des électrons parmi les quantiques états a changé par rapport au cas  $T = 0\text{ K}$ .

Deux électrons du niveau  $E_4$  ont a gagné suffisamment d'énergie pour sauter à  $E_5$ , et un électron de  $E_3$  est passé à  $E_4$ . Comme les changements de température, la distribution des électrons en fonction des changements d'énergie.

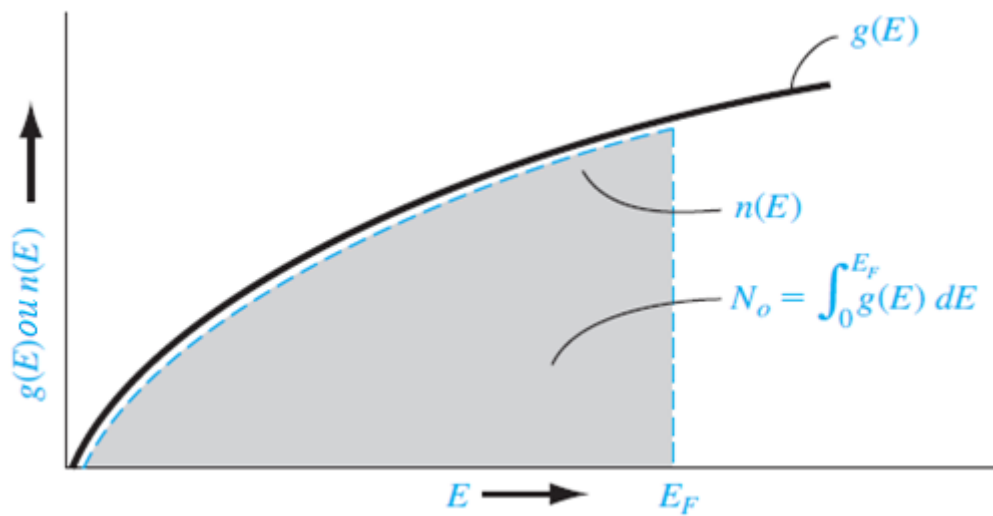


Figure III.4 Densité des états quantiques et des électrons dans un système d'énergie continue à  $T = 0\text{ K}$ .

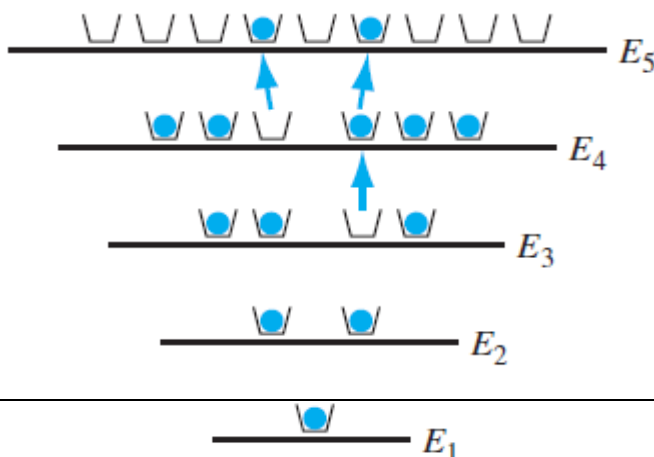


Figure III.5 : États d'énergie discrets et états quantiques pour le



*même système illustré à la figure III.3 pour  $T = 0 K$ .*

La distribution de ces électrons entre les états quantiques à  $T = 0K$  est représentée par la ligne pointillée.

Les électrons sont dans l'état d'énergie le plus bas possible de sorte que tous les états inférieurs à  $E_F$  sont remplis et tous les états supérieurs à  $E_F$  sont vides.

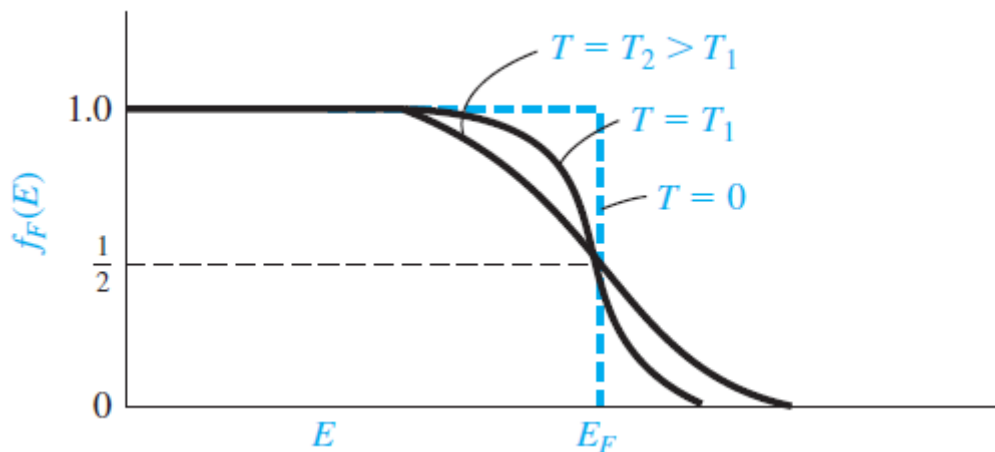
Si  $g(E)$  et  $N_0$  sont connus pour ce système particulier, alors l'énergie de Fermi  $E_F$  peut être déterminée.

Le changement de la distribution électronique entre les niveaux d'énergie pour  $T > 0 K$  peut être vu en traçant la fonction de distribution de Fermi – Dirac. Si on laisse  $E = E_F$  et  $T > 0 K$ , alors l'équation ( III .4) devient :

$$f_F(E = E_F) = \frac{1}{1+\exp(0)} = \frac{1}{1+1} = \frac{1}{2} \quad (\text{III .11})$$

La probabilité qu'un état soit occupé à  $E = E_F$  est de  $1/2$ .

La figure (III.6) montre le Fonction de distribution de *Fermi – Dirac* tracée pour plusieurs températures, en supposant que l'énergie de Fermi est indépendante de la température.



*Figure III.6 La fonction de probabilité de Fermi en fonction de l'énergie pour différentes températures*

Nous pouvons voir que pour des températures supérieures au zéro absolu, il y a une probabilité non nulle que certains états d'énergie au-dessus de  $E_F$  soient occupés par des électrons et certains les états d'énergie inférieurs à  $E_F$  soient vides.

Ce résultat signifie à nouveau que certains électrons ont sauté sur à des niveaux d'énergie plus élevés avec l'augmentation de l'énergie thermique.

On peut voir sur la figure (III.6) que la probabilité pour qu'un niveau d'énergie au-dessus de  $E_F$  étant occupé augmente à mesure que la température augmente et que la probabilité qu'un niveau d'énergie inférieur à  $E_F$  étant vide augmente à mesure que la température augmente.

On peut noter que la probabilité qu'un état à une distance  $dE$  au-dessus de  $E_F$  soit occupé est la même que la probabilité qu'un état à une distance  $dE$  inférieure à  $E_F$  soit vide.

La fonction  $f_F(E)$  est symétrique de la fonction  $1 - f_F(E)$  autour de l'énergie de Fermi,  $E_F$ . Prenons le cas où  $(E - E_F) \gg k_B T$ , où le terme exponentiel dans le dénominateur de l'équation (III.5) est beaucoup plus grand que l'unité.

On peut négliger le 1 dans le dénominateur, donc la fonction de distribution de Fermi - Dirac donc la fonction de distribution de Fermi - Dirac devient :

$$f_F(E) \approx \exp [-(E - E_F) / k_B T] \quad (\text{III.12})$$

L'équation (III.6) est connue sous le nom d'approximation de *Maxwell - Boltzmann*, ou simplement Approximation de Boltzmann, à la fonction de distribution de Fermi - Dirac.

La figure (III.7) montre la fonction de probabilité de Fermi - Dirac et l'approximation de Boltzmann. Cela donne une indication de la gamme d'énergies sur laquelle l'approximation est valide.

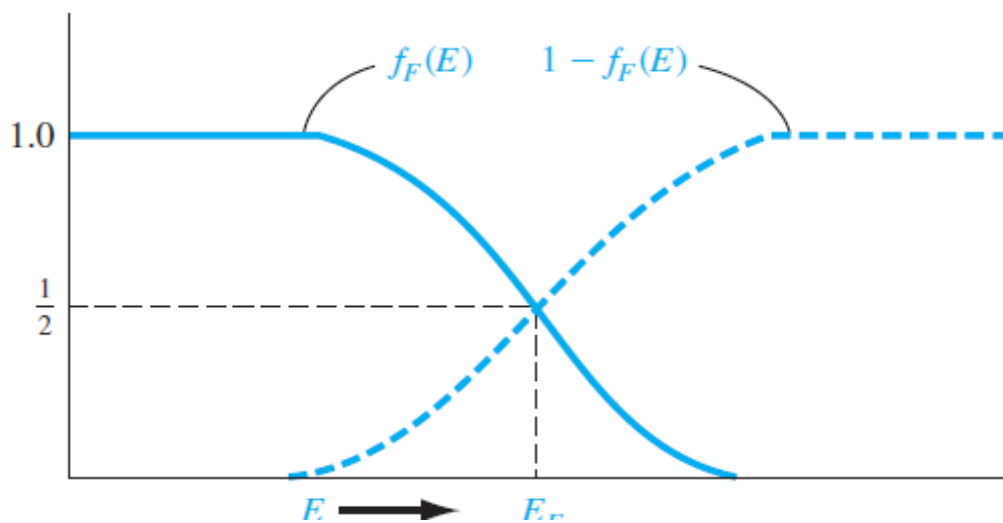
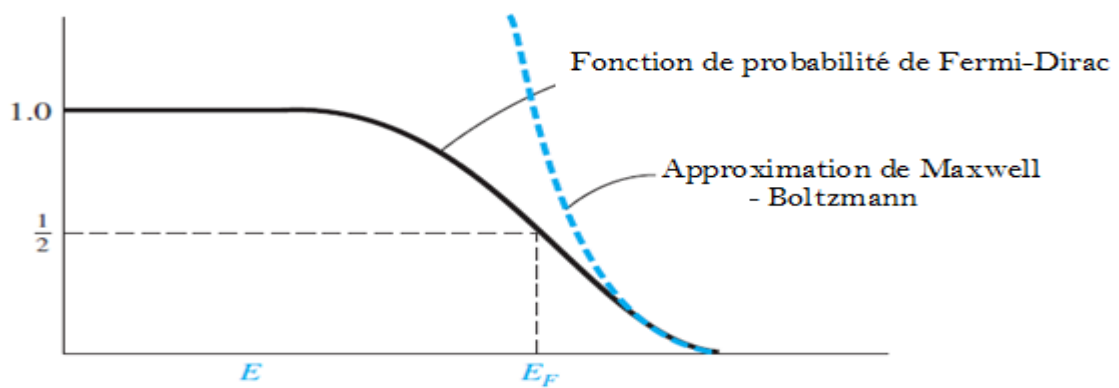




Figure III.7 La probabilité qu'un état soit occupé,  $f_F(E)$ , et la probabilité qu'un état soit vide,  $1 - f_F(E)$ .

Figure III.8 La Fonction de probabilité de Fermi-Dirac et l'Approximation de Maxwell - Boltzmann.



## Chapitre IV :. Semiconducteur à l'équilibre thermodynamique

#### IV.1 Distribution d'équilibre des électrons et des trous

Le courant électrique est proportionnel à la vitesse à laquelle les porteurs de charge se déplacent. Dans un semi-conducteur, deux types de charge porteur, l'électron et le trou, peuvent contribuer à un courant électrique.

La densité d'électrons et trous est lié à la fonction de densité d'états et à la fonction de distribution de Fermi.

Une discussion qualitative de ces relations être suivie d'une dérivation mathématique plus rigoureuse de l'équilibre thermique concentration d'électrons et de trous.

La distribution (par rapport à l'énergie) des électrons dans la bande de conduction est donnée par la densité d'états quantiques autorisés multipliée par la probabilité qu'un état soit occupé par un électron. Elle est écrite sous forme d'équation comme :

$$n(E) = g_c(E)f_F(E) \quad (\text{IV .1})$$

où  $f_F(E)$  est la fonction de probabilité de Fermi – Dirac et  $g_c(E)$  est la densité d'états quantique dans la bande de conduction. La concentration totale d'électrons par unité de

volume dans la bande de conduction est alors déterminée en intégrant l'équation (IV.1) sur l'ensemble énergie de bande de conduction.

De même, la distribution (par rapport à l'énergie) des trous dans la bande de valence est la densité des états dans la bande de valence multipliée par la probabilité qu'un état ne soit pas occupé par un électron. Nous pouvons exprimer cela comme :

$$p(E) = g_v(E)[1 - f_F(E)] \quad (\text{IV.2})$$

La concentration totale des trous par unité de volume est trouvée en intégrant cette fonction sur toute l'énergie de la bande de valence.

Pour trouver les concentrations d'électrons et de trous à l'équilibre thermodynamique, nous devons déterminer la position de l'énergie de Fermi  $E_F$  par rapport au bas de l'énergie de la bande de conduction  $E_c$  et le sommet de l'énergie de la bande de valence  $E_v$ , nous considérerons dans un premier temps un semi-conducteur intrinsèque.

Un semi-conducteur idéal intrinsèque est un semi-conducteur pur sans atomes d'impureté et sans défauts de réseau dans le cristal (par exemple, silicium pur).

Nous avons discuté dans le précédent chapitre que, pour un semi-conducteur intrinsèque à  $T = 0 K$ , tous les états d'énergie dans la bande de valence est remplie d'électrons et tous les états d'énergie de la conduction bande sont vides d'électrons. L'énergie de Fermi doit donc être quelque part entre  $E_c$  et  $E_v$  (l'énergie de Fermi n'a pas besoin de correspondre à une énergie).

Lorsque la température commence à augmenter au-dessus de  $0 K$ , les électrons de valence gagnent l'énergie thermique. Quelques électrons dans la bande de valence peuvent gagner une énergie suffisante pour sauter dans la bande de conduction. Lorsqu'un électron saute de la bande de valence dans la conduction bande, un état vide ou un trou, est créé dans la bande de valence.

Dans un semi-conducteur intrinsèque, les électrons et les trous sont créés par paires par l'énergie thermique afin que le nombre d'électrons dans la bande de conduction soit égal au nombre de trous dans la bande de valence

La figure (IV.1) montre un graphique de la fonction de densité d'états dans la bande de conduction  $g_c(E)$ , la densité d'états fonctionne dans la bande de valence  $g_v(E)$ , et la fonction de probabilité de Fermi – Dirac pour  $T = 0 K$  lorsque  $E_F$  est approximativement à mi-chemin entre  $E_c$  et  $E_v$ . Si l'on suppose, pour le moment, que les masses efficaces d'électrons et de trous sont égal, alors  $g_c(E)$  et  $g_v(E)$ , sont des fonctions symétriques autour de l'énergie intermédiaire (l'énergie à mi-chemin entre  $E_c$  et  $E_v$ ).

Nous avons noté précédemment que la fonction  $f_F(E)$  pour  $E > E_F$  est symétrique de la fonction  $1 - f_F(E)$  pour  $E < E_F$  autour de l'énergie  $E = E_F$ .

Cela signifie également que la fonction  $f_F(E)$  pour  $E = E_F + dE$  est égale à la fonction  $1 - f_F(E)$  pour  $E = E_F - dE$ .

La figure (IV.1.b) est une vue agrandie du graphique de la figure (IV.1. a) montrant  $f_F(E)$  et  $g_c(E)$  au-dessus de l'énergie de la bande de conduction  $E_c$ .

Le produit de  $g_c(E)$  et  $f_F(E)$  est la distribution des électrons  $n(E)$  dans la bande de conduction donnée par l'équation (IV.1). Ce le produit est représenté sur la figure (IV.1.a.) Figure (IV.1.c), qui est une vue agrandie du graphique sur la figure (IV.1.a) montre  $[1 - f_F(E)]$  et  $g_v(E_F)$  en dessous de l'énergie de la bande de valence  $E_v$ .

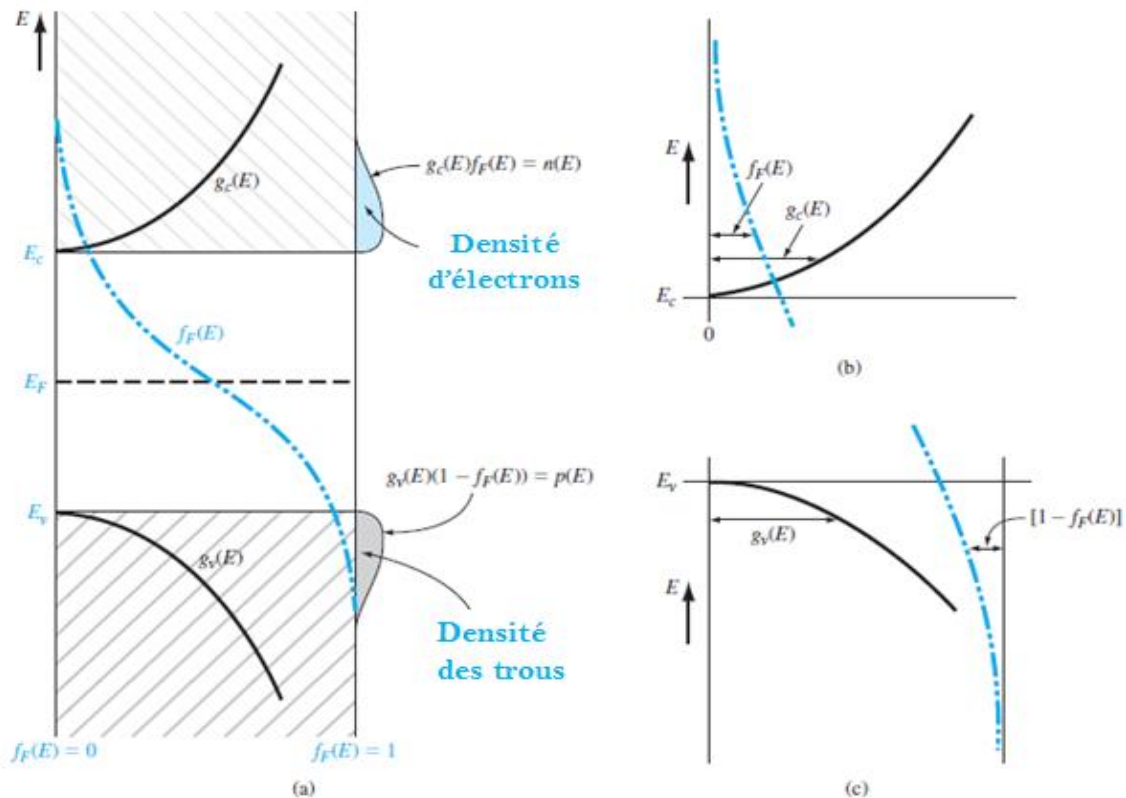


Figure IV.1 (a) Fonctions de densité d'états, fonction de probabilité de Fermi – Dirac et aires représentant l'électron et le trou les concentrations pour le cas où  $E_f$  est proche de l'énergie intermédiaire; (b) vue élargie près de l'énergie de la bande de conduction; et (c) une vue élargie près de l'énergie de la bande de valence.

Le produit de  $g_v(E) \cdot [1 - f_F(E)]$  est la distribution des trous  $p(E)$  dans la bande de valence donnée par l'équation (IV.2).

De cela, nous voyons que si  $g_c(E)$  et  $g_v(E)$  sont symétriques, l'énergie de Fermi doit être à l'énergie du milieu de la bande interdite pour obtenir des concentrations égales d'électrons et de trous.

Si les masses efficaces de l'électron et trou ne sont pas exactement égales, alors la densité effective des états fonctions  $g_c(E)$  et  $g_v(E)$  ne sera pas exactement symétrique par rapport à l'énergie du milieu de la bande interdite. Le niveau de Fermi pour le semi-conducteur intrinsèque se déplacera alors légèrement de l'énergie du milieu de la bande interdite dans l'ordre pour obtenir des concentrations égales d'électrons et de trous.

### IV.1.1 Les équations $n_0$ et $p_0$

Nous avons vu que l'énergie de Fermi pour un semi-conducteur intrinsèque est proche de l'énergie du milieu de la bande interdite

En dérivant les équations de la concentration à l'équilibre thermique des électrons  $n_0$  et la concentration à l'équilibre thermique des trous  $p_0$ .

Nous verrons plus loin que, dans des situations particulières, l'énergie de Fermi peut dévier de cette énergie du milieu de gap.

Nous supposons cependant dans un premier temps que le niveau de Fermi reste dans la bande interdite. On parle alors de semi-conducteur non dégénéré

#### IV.1.1.1 Concentration d'électrons à l'équilibre thermodynamique

La concentration d'électrons peut être trouvée en intégrant l'équation (IV.1) sur l'énergie de la bande de conduction, où :

$$n_0 = \int g_c(E) f_F(E) dE \quad (\text{IV.3})$$

La limite inférieure d'intégration est  $E_c$  et la limite supérieure d'intégration doit être le haut de l'énergie de bande de conduction permise.

Cependant, puisque la probabilité de Fermi la fonction s'approche rapidement de zéro avec une énergie croissante comme indiqué sur la figure IV.1.a, nous pouvons considérer que la limite supérieure de l'intégration est l'infini( $\infty$ ).

Nous supposons que l'énergie de Fermi est dans la bande d'énergie interdite.

Pour les électrons dans la bande de conduction, nous avons  $E > E_c$ . Si  $(E_c - E_F) \gg k_B T$ ,

alors  $(E - E_F) \gg k_B T$ , de sorte que la fonction de probabilité de Fermi se réduit à l'approximation de Boltzmann, qui est :

$$f_F(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)} \approx \exp\left[\frac{-(E - E_F)}{k_B T}\right] \quad (\text{IV .4})$$

En appliquant l'approximation de Boltzmann à l'équation (IV.1), l'équilibre thermodynamique, la densité d'électrons dans la bande de conduction est trouvée à partir de :

$$n_0 = \int_{E_c}^{\infty} \frac{4\pi(2m_n^*)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E - E_c} \exp\left[\frac{-(E - E_F)}{k_B T}\right] dE \quad (\text{IV .5})$$

L'intégrale de l'équation (IV .5) peut être résolue plus facilement en faisant un changement de variable. Si nous posons :

$$\eta = \frac{(E - E_c)}{k_B T} \quad (\text{IV .6})$$

alors l'équation (IV .6) devient :

$$n_0 = \frac{4\pi(2m_n^* k_B T)^{3/2}}{h^3} \exp\left[\frac{-(E_c - E_F)}{k_B T}\right] \int_0^{\infty} \eta^{1/2} \exp(-\eta) d\eta \quad (\text{IV .7})$$

L'intégrale est la fonction gamma, avec une valeur de :

$$\int_0^{\infty} \eta^{1/2} \exp(-\eta) d\eta = \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \quad (\text{IV .8})$$

Alors l'équation (IV .8) devient :

$$n_0 = 2 \left(\frac{(2\pi m_n^* k_B T)}{h^2}\right)^{3/2} \exp\left[\frac{-(E_c - E_F)}{k_B T}\right] \quad (\text{IV .9})$$

On peut définir un paramètre  $N_c$  par :

$$N_c = 2 \left(\frac{(2\pi m_n^* k_B T)}{h^2}\right)^{3/2} \quad (\text{IV .10})$$

$m_n^* = m_n^*$  : masse effective des électrons pour le semi-conducteur à gap direct

$m_n^* = \left(n m_l^{*1/2} m_t\right)^{2/3}$  : masse effective des électrons pour le semi-conducteur à gap indirect

A L'équilibre thermique la concentration d'électrons dans la bande de conduction peut s'écrire :

$$n_0 = N_c \exp \left[ \frac{-(E_c - E_F)}{k_B T} \right] \quad (\text{IV .11})$$

Le paramètre  $N_c$  est appelé densité équivalent d'états fonction dans la conduction bande. Si nous supposons que  $m_n^* = m_0$ , alors la valeur de la densité effective des états fonctionnant à  $T = 300 \text{ K}$  est  $N_c = 2,5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , qui est de l'ordre de grandeur de  $N_c$  pour la plupart des semi-conducteurs.

Si la masse effective de l'électron est plus grand ou plus petit que  $m_0$ , alors la valeur de  $m_n^*$  change en conséquence, mais est toujours du même ordre de grandeur.

#### IV.1.1.2 Concentration du trou à l'équilibre thermodynamique :

La concentration d'équilibre thermique des trous dans la bande de valence est trouvée en intégrant l'équation (IV.2) sur l'énergie de la bande de valence, où :

$$p_0 = \int g_v(E) [(1 - f_F(E))] dE \quad (\text{IV .12})$$

On peut noter que :

$$1 - f_F(E) = \frac{1}{1 + \exp \frac{(E_F - E)}{k_B T}} \quad (\text{IV .13})$$

Pour les états d'énergie dans la bande de valence,  $E < E_v$ . Si  $(E_F - E_v) \gg kT$  (la fonction de Fermi est toujours supposé être dans la bande interdite), alors nous avons une forme légèrement différente de l'approximation de Boltzmann. L'équation (IV .13) peut s'écrire :

$$1 - f_F(E) = \frac{1}{1 + \exp \frac{(E_F - E)}{k_B T}} \approx \exp \left[ \frac{-(E_F - E)}{k_B T} \right] \quad (\text{IV .14})$$

En appliquant l'approximation de Boltzmann de l'équation (IV .13) à l'équation (IV .14), nous trouver que la concentration à l'équilibre thermique des trous dans la bande de valence est :

$$p_0 = \int_{-\infty}^{E_c} \frac{4\pi(2m_p^*)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E_v - E} \exp \left[ \frac{-(E_F - E)}{k_B T} \right] dE \quad (\text{IV .15})$$

Où la limite inférieure d'intégration est considérée comme moins infinité au lieu du bas de la bande de valence. Le terme exponentiel décroît assez rapidement pour que cette approximation est valable.

L'équation (IV .15) peut être résolue plus facilement en effectuant à nouveau un changement de variable. Si nous laissons :

$$\eta' = \frac{(E_c - E)}{k_B T} \quad (\text{IV .16})$$

alors l'équation (IV .14) devient :

$$p_0 = \frac{-4\pi(2m_p^*k_B T)^{3/2}}{h^3} \exp\left[\frac{-(E_F - E_v)}{k_B T}\right] \int_{+\infty}^0 (\eta')^{1/2} \exp(-\eta') d\eta' \quad (\text{IV .17})$$

où le signe négatif provient du différentiel  $dE = k_B T d\eta'$ . Notez que la limite inférieure de devient lorsque  $E = -\infty$ . Si nous changeons l'ordre d'intégration, nous introduisons un autre

signe moins. De l'équation (IV .8), l'équation (IV .17) devient :

$$p_0 = 2 \left( \frac{(2\pi m_p^* k_B T)}{h^2} \right)^{3/2} \exp\left[\frac{-(E_F - E_v)}{k_B T}\right] \quad (\text{IV .18})$$

On peut définir un paramètre  $N_v$  par :

$$N_v = 2 \left( \frac{(2\pi m_p^* k_B T)}{h^2} \right)^{3/2} \quad (\text{IV .19})$$

qui s'appelle la densité équivalente dans la bande de valence. Le paramètre  $m_p^*$  est la masse effective de densité d'états dans la bande de valence. A L'équilibre thermodynamique , la concentration de trous dans la bande de valence peut maintenant s'écrire :

$$p_0 = N_v \exp\left[\frac{-(E_F - E_v)}{k_B T}\right] \quad (\text{IV .20})$$

La magnitude de  $N_v$  est également de l'ordre de  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$  à  $T = 300 \text{ K}$  pour la plupart semi-conducteurs.

### IV.1.2 Densité d'états dans les bandes permises

Dans un cristal à trois dimensions, la densité d'états dans l'espace des k est donnée par l'expression (1-10). La densité d'états dans l'espace des énergies  $g(E)$  est obtenue en explicitant k en fonction de l'énergie à partir des courbes de dispersion.



Au voisinage de chacun des extrema, on peut utiliser l'approximation parabolique.

#### IV 1.2.1. Bande de conduction

##### IV.1.2.1.1 Semiconducteur à gap direct

La bande de conduction présente un minimum unique, et isotrope dans un matériau cubique. Dans l'approximation parabolique, l'énergie des électrons est alors donnée par l'expression de sorte que le vecteur d'onde  $k$  est donné par :

$$k = \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} (E - E_c) \right)^{1/2} \quad (\text{IV .21})$$

La densité d'états étant constante dans l'espace des  $k$ , le nombre d'états contenus dans la sphère de rayon  $k$  est donné par :

$$N = g(k)V_k = \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \pi k^3 \quad (\text{IV .22})$$

ou en explicitant le vecteur  $k$  en fonction de l'énergie :

$$N = \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \pi \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} (E - E_c) \right)^{3/2} \quad (\text{IV .23})$$

La densité d'états par unité d'énergie est donnée par la dérivée  $dN/dE$ , soit :

$$N_c(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_c)^{1/2} \quad (\text{IV .23})$$

avec  $m_n^* = m_e$

##### IV.1.2.1.2 Semi-conducteur à gap indirect

La bande de conduction est multivallée, dans chacun des minima l'énergie des électrons est donnée par l'expression (IV.23). Les surfaces d'énergie constante sont des ellipsoïdes de révolution, on ramène ces surfaces à des sphères en dilatant les axes perpendiculaires à l'axe de révolution de l'ellipsoïde. En d'autres termes, l'équation (IV.23) peut s'écrire :

$$E = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_l} \left( (k_{\parallel} - k_0)^2 + \frac{m_l}{m_t} k_{\perp}^2 \right) \quad (\text{IV .24})$$

Posons :  $k'_{\perp} \left( \frac{m_l}{m_t} \right)^{1/2} k_{\perp}$      $k'_0 = k_0$  (IV .25)

Dans la mesure où la seule composante non nulle du vecteur  $k_0$  est la composante  $k_0$  suivant l'axe de l'ellipsoïde, l'expression (IV .25) s'écrit :

(IV .26)

$$E = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_l} (k' - k_0)^2$$

Parallèlement, en raison de la dilatation des axes  $k_x$  et  $k_y$  perpendiculaires à l'axe  $k_z$  de l'ellipsoïde, la densité d'états dans l'espace des  $k'$  s'écrit :

$$g(k') = g(k) \frac{k_x k_y k_z}{k'_x k'_y k'_z} = g(k) \frac{m_t}{m_l} \quad (\text{IV .27})$$

$$g(k') = \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{m_t}{m_l} \quad (\text{IV .28})$$

Le nombre d'états contenus dans la sphère centrée en  $k'_0$  et de rayon  $k' - k'_0$  est donnée par :

$$N_l = \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{m_t}{m_l} \frac{4}{3} \pi (k' - k'_0)^3 \quad (\text{IV .29})$$

où en explicitant  $(k' - k'_0)$  à partir de l'expression :

$$N_l = \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{m_t}{m_l} \frac{4}{3} \pi (E - E_c)^{3/2} = \frac{1}{\pi^2} \frac{1}{3} \left( \frac{2(m_l^{1/2} m_t)^{2/3}}{\hbar^2} (E - E_c) \right)^{3/2} \quad (\text{IV .30})$$

En tenant compte du nombre  $n$  d'ellipsoïdes équivalents, le nombre total d'états d'énergie  $E$  est donné par  $N = nN_l$ , soit :

$$N_l = \frac{1}{\pi^2} \frac{1}{3} \left( \frac{2(m_l^{1/2} m_t)^{2/3}}{\hbar^2} (E - E_c) \right)^{3/2} \quad (\text{IV .31})$$

La densité d'états dans l'espace des énergies est donnée comme précédemment par  $dN / dE$  et s'écrit :

$$N_c(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_c}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_c)^{1/2} \quad (\text{IV .32})$$

Avec :  $m_c = (m_l^{1/2} m_t)^{2/3}$

Dans l'expression de la densité d'états,  $m_e$  joue dans le semiconducteur multivallée le même rôle que  $m_c$  dans le semiconducteur univallée,  $m_e$  est appelée masse effective de densité d'états.

	Si	Ge	GaP
$n$	6	4	3
$m_c/m_0$	1,06	0,55	0,78

**IV.1.2.2. Bande de valence**

La densité d'états dans la bande de valence est la somme des densités d'états de trous lourds et de trous légers. Dans l'approximation isotrope et parabolique chacune d'elles se met sous une forme analogue à l'expression (III .32). La densité d'états globale est donnée par :

$$N_v(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (m_{hh}^{1/2} + m_{lh}^{1/2})(E_v - E)^{1/2} \quad (\text{IV .33})$$

en posant :  $m_v = (m_{hh}^{3/2} + m_{lh}^{3/2})^{2/3}$

$m_{hh}, m_{lh}$  Les masses effectives des trous lourds et légers .

La densité d'états s'écrit :

$$N_v(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_v}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E_v - E)^{1/2} \quad (\text{IV .34})$$

$m_v$  : est la masse effective de densité d'états de la bande de valence.

	<b>Si</b>	<b>Ge</b>	<b>GaP</b>	<b>GaAs</b>	<b>InP</b>
$m_v/m_0$	0,59	0,36	0,83	0,64	0,87

En

résumé, quel que soit le type de semiconducteur, on peut écrire la densité d'états au voisinage de l'extremum d'une bande sous la forme générale

$$N(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E - E_0)^{1/2} \quad (\text{IV .35})$$

L'énergie est comptée positivement vers le haut pour les électrons et vers le bas pour les trous.  $E_0$  est l'énergie du bord de bande et  $m^*$  la masse effective de densité d'états correspondante.

**IV 1.2.3 Concentration intrinsèque des porteurs**

Pour un semi-conducteur intrinsèque, la concentration d'électrons dans la bande de conduction est égale à la concentration de trous dans la bande de valence.

On peut désigner par  $n_i$  et  $p_i$  les concentrations d'électrons et de trous, respectivement, dans le semi-conducteur intrinsèque.

Ces paramètres sont généralement appelés concentration électronique intrinsèque et concentration intrinsèque des trous.

Cependant, comme  $n_i = p_i$ , donc normalement nous utilisons simplement le paramètre  $n_i$  comme la concentration intrinsèque de porteurs, qui se réfère soit à la concentration intrinsèque des concentration d'électrons ou de trous.

Le niveau d'énergie de Fermi pour le semi-conducteur intrinsèque est appelé l'énergie de Fermi intrinsèque, ou  $E_F = E_{Fi}$  Si nous appliquons les équations (IV. 11) et (IV. 20) au semi-conducteur 'intrinsèque, alors nous pouvons écrire :

$$n_0 = n_i = N_c \exp \left[ \frac{-(E_c - E_{Fi})}{k_B T} \right] \quad (\text{III .36})$$

$$p_0 = p_i = n_i = N_v \exp \left[ \frac{-(E_{Fi} - E_v)}{k_B T} \right] \quad (\text{III .37})$$

Si nous prenons le produit des équations (IV .36) et (IV .37), nous obtenons :

$$n_i^2 = N_c N_v \exp \left[ \frac{-(E_c - E_{Fi})}{k_B T} \right] \cdot \exp \left[ \frac{-(E_{Fi} - E_v)}{k_B T} \right] \quad (\text{III .38})$$

$$n_i^2 = N_c N_v \exp \left[ \frac{-(E_c - E_v)}{k_B T} \right] = N_c N_v \exp \left[ \frac{-E_g}{k_B T} \right] \quad (\text{III .39})$$

où  $E_g$ : est l'énergie de la bande interdite. Pour un matériau semi-conducteur donné à une température constante, la valeur de  $n_i$  est une constante, et indépendante de l'énergie de Fermi .

Le tableau (II.4) répertorie les valeurs communément acceptées de  $n_i$  pour le silicium, l'arséniure de gallium et le germanium à  $T=300$  K.

La concentration intrinsèque des porteurs est une fonction de la température.

**Tableau (II.4) valeurs de  $n_i$  pour le Si,GaAs,Ge à T 300 K.**

Silicium	$n_i = 1.5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$
Arséniure de gallium	$n_i = 1.8 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-3}$
Germanium	$n_i = 2.4 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$

#### IV1.2.4 La position intrinsèque au niveau de Fermi

Nous avons fait valoir qualitativement que le niveau d'énergie de Fermi est situé près du centre de la bande interdite pour le semi-conducteur intrinsèque.

Nous pouvons spécifiquement calculer la position intrinsèque du niveau de Fermi. Puisque les concentrations d'électrons et de trous sont égales, en portant les équations (IV .36) et (IV .37) égales l'une à l'autre, nous avons, si nous prenons le logarithme des deux côtés de cette équation et résolvons pour  $E_{Fi}$ , nous obtenons :

$$N_c \exp \left[ \frac{-(E_c - E_{Fi})}{k_B T} \right] = N_v \exp \left[ \frac{-(E_{Fi} - E_v)}{k_B T} \right] \quad (\text{IV .40})$$

Si nous prenons le logarithme naturel des deux membres de cette équation et résolvons pour  $E_{Fi}$ , nous obtenons :

$$E_{Fi} = \frac{1}{2} (E_c - E_v) + \frac{1}{2} k_B T \left( \frac{N_v}{N_c} \right) \quad (\text{IV .41})$$

À partir des définitions de  $N_c$  et  $N_v$  données par les équations (IV.10) et (IV.19) respectivement, L'équation (IV .41) peut être écrite comme :

$$E_{Fi} = \frac{1}{2} (E_c - E_v) + \frac{3}{4} k_B T \left( \frac{m_p^*}{m_n^*} \right) \quad (\text{IV .42})$$

**Tableau III :5. Quelques valeurs de  $N_c, N_v$ , pour divers matériaux**

	$m_c / m_0$	$m_v / m_0$	$N_c (10^{19} \text{ cm}^{-3})$	$N_v (10^{19} \text{ cm}^{-3})$
<b>Si</b>	1,06	0,59	2,7	1,1
<b>Ge</b>	0,55	0,36	1	0,5
<b>GaP</b>	0,78	0,83	1,7	1,9
<b>GaAs</b>	0,067	0,64	0,04	1,3
<b>InP</b>	0,073	0,87	0,05	2

On constate que les densités équivalentes d'états sont de l'ordre de  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$  dans la bande de valence pour tous les semiconducteurs. En ce qui concerne la bande de conduction, on retrouve une différence importante entre les semiconducteurs à gap indirect, tels que Si, Ge et GaP, et les semiconducteurs à gap direct, tels que GaAs et InP. Dans les premiers la densité équivalente d'états de la bande de conduction est de l'ordre de  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , dans les seconds cette densité est de l'ordre de  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .

## IV.2 Semiconducteur extrinsèque à la température ambiante

### IV.2.1 Dopage

L'une des propriétés les plus importantes d'un semi-conducteur cristallin est qu'il peut être dopé avec différents types et concentrations d'impuretés pour faire varier sa résistivité.

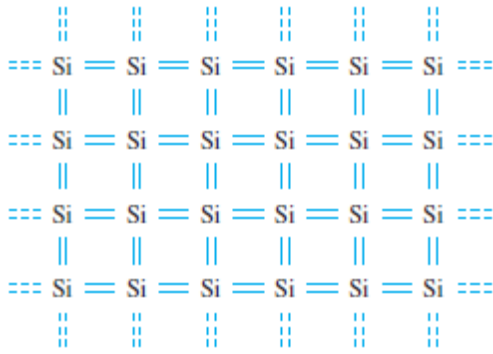
Aussi, quand ces impuretés sont ionisées, ils laissent une charge densité qui se traduit par un champ électrique et parfois une barrière de potentiel à l'intérieur du semi-conducteur. De telles propriétés sont absentes dans un métal ou un isolant.

#### IV.2.1.1 Semiconducteur de type n

La figure (IV.2) montre trois représentations de liaison de base d'un semi-conducteur.

La figure (IV.2.a) montre du silicium intrinsèque, qui est très pur et contient une quantité négligeable de impuretés.

Chaque atome de silicium partage ses quatre électrons de valence avec les quatre voisins formant quatre liaisons covalentes La figure (IV.2.b) montre du silicium de type n, où un atome de phosphore en substitution avec cinq électrons de valence a remplacé un atome de silicium et un électron chargé négativement est donné au réseau dans la bande de conduction. L'atome de phosphore est appelé un donneur(d'électrons).



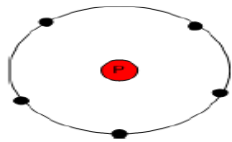
	IIIA	IVA	VA	VIA
	5 B	6 C	7 N	8 O
	13 Al	14 Si	15 P	16 S
IIB	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As
	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb
			52 Te	

### Le phosphore

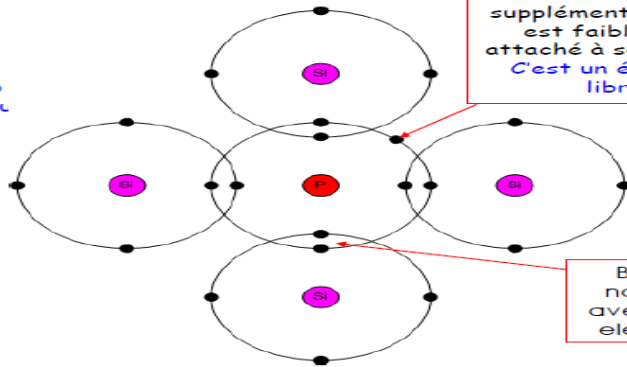
Silicium (Si)      Phosphore (P)



Le phosphore (P) est le numéro dans la classification périodique des éléments



Il possède 15 protons et 15 électrons - 5 de ces électrons sont dans la couche extérieure (électrons de valence)



L'électron supplémentaire de P est faiblement attaché à son atome. C'est un électron libre

Bande normale avec deux électrons

■ Le Phosphore est lié dans le silicium

Figure IV.2 : un atome silicium, un atome de phosphore(donneur)

#### IV.2.1.2 Semiconducteur de type p

La figure (IV.3) de même montre que lorsqu'un atome de bore avec trois électrons de valence remplace un silicium atome, un trou chargé positivement est créé dans la bande de (a) ce et un électron supplémentaire sera accepté pour former quatre liaisons covalentes autour du bore.

	IIIA	IVA	VA	VIA
	5 B	6 C	7 N	8 O
	13 Al	14 Si	15 P	16 S
IIB	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As
	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb
			52 Te	

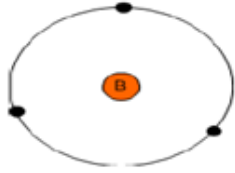
Silicium type-p (trous) dopants "accepteurs"

C'est de type p, et le bore est un accepteur.

(b)

## L'atome de bore

Le Bore (B) est le numéro 5 dans le tableau périodique



Il dispose de 5 protons et 5 électrons.

3 de ces électrons sont dans sa couche externe

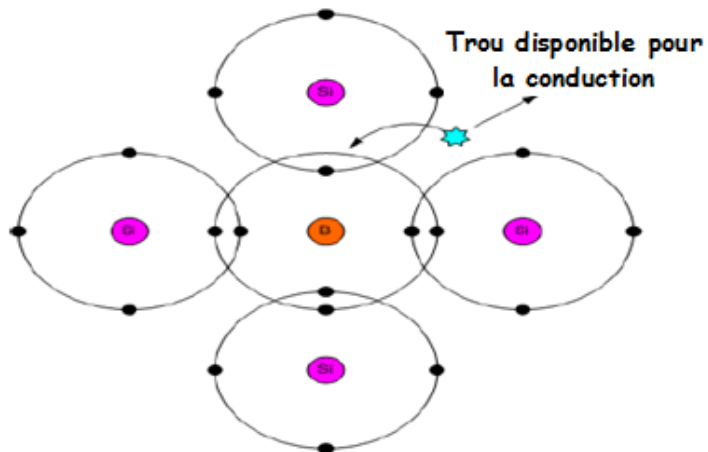


Figure IV.3 : un atome silicium, un atome de Bore(accepteur)

### IV.2.2 Définition et localisation des niveaux énergétiques de donneurs ( $E_d$ ) et accepteurs ( $E_a$ )

#### IV.2.2.1. Niveau donneur

La présence d'impuretés dans le réseau cristallin change d'une manière considérable les propriétés électriques du semi-conducteur.

Considérons par exemple un semiconducteur de la colonne IV comme le silicium, dans lequel on introduit un atome de la colonne V tel que le phosphore.

Dans le réseau cristallin, l'atome phosphore remplace un atome de silicium et établit des liaisons avec ses quatre voisins.

L'atome de phosphore est alors entouré de 9 électrons dont 8 saturent les orbitales liantes du cristal. Le 9<sup>ème</sup> électron occupe alors une orbitale beaucoup plus délocalisée dans le champ de l'ion positif  $P^+$ .

L'énergie de liaison est donnée par la relation suivante (figure IV.4) :  $E_D = E_c - E_d$

$E_d$ : est l'énergie du niveau donneur de l'impureté.



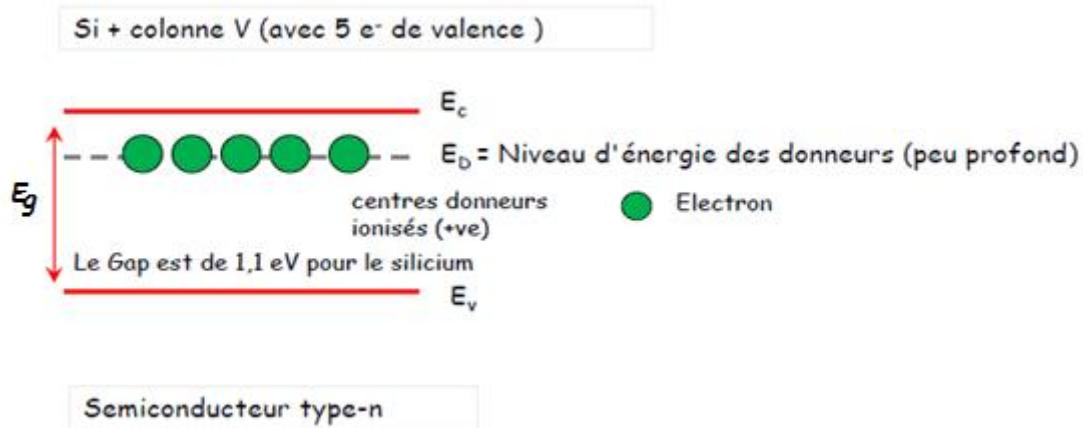


Figure IV.4 Niveau d'énergie des donneurs

L'énergie de liaison de cet électron est de l'ordre de quelques meV dans les semiconducteurs à gap direct et quelques dizaines de meV dans les semiconducteurs à gap indirect (ex dans Si  $\sim 40$  meV) .

A la température ambiante cet électron est donc libéré dans le réseau par agitation thermique et occupe un état de la bande de conduction.

Parallèlement le phosphore a une charge positive excédentaire et devient un ion  $P^+$ .

On dit que le phosphore dans le silicium est un *donneur* en raison du fait qu'il donne un électron de conduction au réseau.

#### IV.2.2.2 Niveau accepteur

Remplaçons un atome de silicium par un atome de la colonne III, tel que le Bore. Dans la coordination tétraédrique, il apparaît maintenant un déficit d'électron. L'électron manquant est alors facilement remplacé par un électron provenant d'une liaison voisine.

Le passage d'un électron depuis une liaison intrinsèque du cristal vers l'atome de Bore entraîne d'une part la création d'un trou dans la bande de valence et d'autre part l'apparition d'une charge négative excédentaire au voisinage de l'atome de Bore.

L'atome de Bore., qui est appelé *accepteur*, devient alors un ion négatif  $B^-$ .

Par analogie avec l'électron sur le donneur, on peut considérer que le trou qui apparaît dans la bande de valence était piégé sur l'accepteur.

L'énergie qu'il faut pour transférer un électron de la bande de valence sur l'accepteur est alors appelée énergie de liaison du trou sur l'accepteur.  $E_A = E_a - E_v$  .

$E_A$  : est l'énergie du niveau accepteur de l'impureté. Cette énergie de liaison est de l'ordre de quelques dizaines de meV.

### IV.2.3 Densité de porteurs et niveau de Fermi

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

$N_d^+$  le nombre de donneurs ionisés, c'est-à-dire ayant libéré leur électron supplémentaire.

$N_a^-$  le nombre d'accepteurs ionisés, c'est-à-dire ayant accepté un électron supplémentaire.

L'ensemble des charges positives est égal à l'ensemble des charges négatives. C'est l'équation de neutralité électrique du matériau qui s'écrit :

$$p + N_d^+ = n + N_a^- \quad (\text{IV .43})$$

où  $n$  et  $p$  représentent les densités de porteurs libres et  $N_a^-$  et  $N_d^+$  les densités d'accepteurs et de donneurs ionisés.

A température ambiante, l'énergie  $k_B T$  est de même ordre de grandeur que les énergies de liaison de l'électron du donneur et de trous de l'accepteur. Ceci veut dire que tous les donneurs et accepteurs sont ionisés. c'est à dire que  $N_d^+ = N_d$  et que  $N_a^- = N_a$

L'équation de neutralité précédente s'écrit donc :

$$p + N_d^+ = n + N_a^- \quad (\text{IV .44})$$

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

#### IV.2.3.1 Semiconducteur compensé - Semi-Isolant

Il existe toujours dans un semiconducteur des impuretés incontrôlées que l'on appelle impuretés résiduelles. Pour compenser ces impuretés, on dope le semiconducteur de manière à se rapprocher le plus possible de la condition  $N_d = N_a$ . Supposons que la condition soit réalisée, l'équation s'écrit alors  $n = p$  et par conséquent  $n \cdot p = n_i^2$

La densité de porteurs libres dans le semiconducteur est la même que s'il était intrinsèque.

La densité intrinsèque  $n_i$  qui est fonction du gap du semiconducteur, est généralement très faible à la température ambiante.

Le semiconducteur est alors, en ce qui concerne la conductivité, plus proche de l'isolant que du conducteur, on l'appelle alors semi-isolant.

Le niveau de Fermi, dont la position est réglée par la population de porteurs libres, est donc situé, comme pour un semiconducteur intrinsèque, au voisinage du milieu du gap.

### IV.2.3.2. Semi-conducteurs de type n

Dans un semi-conducteur de type n, la densité en donneur ( $N_d$ ) est supérieure à la densité d'accepteurs ( $N_a$ ). D'après l'équation de neutralité la densité d'électrons ( $n$ ) est supérieure à la densité de trous ( $p$ ).

Les électrons dans ce cas sont appelés les porteurs majoritaires et les trous sont des porteurs minoritaires.

$$N_d > N_a \text{ et } n > p \quad (\text{IV .45})$$

$$p + N_d = n + N_a \quad (\text{IV .46})$$

Avec :  $n \cdot p = n_i^2 \quad (\text{IV .47})$

$$(N_d - N_a)n = n^2 - p n \quad (\text{IV .48})$$

D'où :  $n^2 - (N_d - N_a)n - n_i^2 = 0 \quad (\text{IV .49})$

Les solutions de cette équation sont :

$$n = \frac{1}{2} \left[ (N_d - N_a) + ((N_d - N_a)^2 + 4n_i^2)^{1/2} \right] \quad (\text{IV .50})$$

$$p = -\frac{1}{2} \left[ (N_d - N_a) - ((N_d - N_a)^2 + 4n_i^2)^{1/2} \right] \quad (\text{IV .51})$$

La valeur absolue donne la densité de trous.

$$p = -\frac{1}{2} \left[ (N_d - N_a) - ((N_d - N_a)^2 + 4n_i^2)^{1/2} \right] \quad (\text{IV .52})$$

$$p = -\frac{1}{2} \left[ (N_d - N_a) - ((N_d - N_a)^2 \left[ 1 + \frac{4n_i^2}{(N_d - N_a)^2} \right]^{1/2} \right] \quad (\text{IV .53})$$

$$p \approx -\frac{1}{2} \left[ (N_d - N_a) - (N_d - N_a) \left[ 1 + \frac{2n_i^2}{(N_d - N_a)^2} \right] \right] \quad (\text{IV .54})$$

On a :  $((N_d - N_a)^2 \gg 4n_i^2)$

$$p \approx -\frac{1}{2} \left[ (N_d - N_a) - (N_d - N_a) - \frac{2n_i^2}{(N_d - N_a)} \right] \approx \frac{n_i^2}{N_d - N_a} \quad (\text{IV .56})$$

Résultat qu'on obtient simplement à partir :  $n \cdot p = n_i^2$  et  $n = N_d - N_a$ .

En pratique  $N_d, N_a$  et  $(N_d - N_a)$  sont des densités très élevées, elles sont supérieures à  $n_i^2$ .

Ceci permet d'écrire :  $n \approx N_d - N_a$ . ( IV .57.a)

$$p \approx \frac{n_i^2}{N_d - N_a} \quad \text{( IV .57.b)}$$

### IV.2.3.3. Semi-conducteurs de type p

Dans ce type de semi-conducteur la densité en accepteurs ( $N_a$ ) est supérieure à la densité de donneurs ( $N_d$ ). Dans ce cas, les porteurs majoritaires sont les trous.

Les densités de porteurs sont :

$$N_a > N_d \text{ et } p > n \quad \text{( IV .58.a)}$$

$$p \approx (N_a - N_d) \quad \text{( IV .58.b)}$$

$$p \approx \frac{n_i^2}{(N_a - N_d)} \quad \text{( IV .59)}$$

### IV.2.4. Niveau de Fermi

La densité de porteurs (électrons) de charges dans un semi-conducteur de type n est donnée par la relation suivante :

$$n = N_d - N_a = N_c \exp \left[ \frac{-(E_c - E_{Fn})}{k_B T} \right] \quad \text{( IV .60)}$$

Avec  $E_{Fn}$  : l'énergie du niveau de Fermi dans ce cas .

La densité de porteurs (trous) de charges dans un semi-conducteur de type p est donnée par la relation suivante :

$$p = N_a - N_d = N_v \exp \left[ \frac{(E_v - E_{Fp})}{k_B T} \right] \quad \text{( IV .61)}$$

Avec  $E_{Fp}$  : l'énergie du niveau de Fermi dans ce cas .

Dans les deux types de semi-conducteurs, il est nécessaire de définir la position du niveau de Fermi par sa distance au niveau de Fermi intrinsèque  $E_{Fi}$ .

Dans un semi-conducteur intrinsèque les densités sont égales.

$$n = p = n_i = N_c \exp \left[ \frac{-(E_c - E_{Fi})}{k_B T} \right] = N_v \exp \left[ \frac{(E_v - E_{Fi})}{k_B T} \right] \quad \text{( IV .62)}$$

Alors: 
$$n = N_c \exp \left[ \frac{-(E_c - E_{Fn})}{k_B T} \right] \quad (\text{IV .63})$$

$$p = N_v \exp \left[ \frac{(E_v - E_{Fp})}{k_B T} \right] \quad (\text{IV .64})$$

D'où

$$\frac{n}{n_i} = \exp \frac{-(E_c - E_{Fn})}{k_B T} \times \exp \frac{(E_v - E_{Fp})}{k_B T} \quad (\text{IV .65})$$

$$\frac{n}{n_i} = \exp \frac{(E_{Fn} - E_{Fi})}{k_B T} \quad (\text{IV .66})$$

$$n = n_i \exp \frac{(E_{Fn} - E_{Fi})}{k_B T} \quad (\text{IV .67})$$

On pose :  $E_{Fn} - E_{Fi} = e\phi_{Fi}$ , la relation s'écrit donc :

$$n = n_i \exp \frac{e\phi_{Fi}}{k_B T} \quad (\text{IV .68})$$

De manière analogue la densité de trous dans un SC (p) s'écrit :

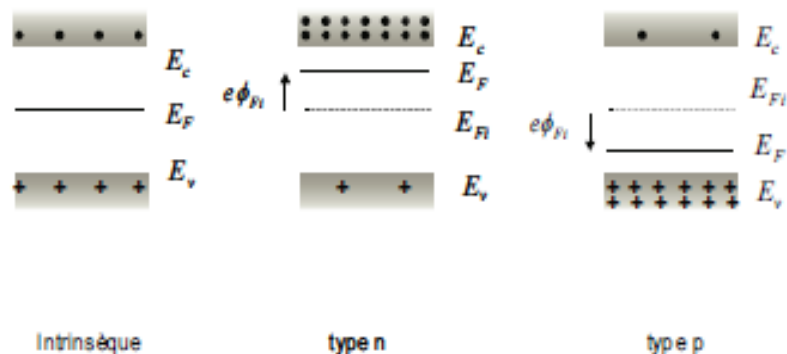
$$p = n_i \exp \frac{e\phi_{Fi}}{k_B T} \quad (\text{IV .69})$$

Remarques :

- si :  $e\phi_{Fi} > 0 \Rightarrow n > n_i$  et  $p < n_i$ ; le semi-conducteur est de type n .
- si :  $e\phi_{Fi} < 0 \Rightarrow p > n_i$  et  $n < n_i$ ; le semi-conducteur est de type p.

se déduit des deux relations précédentes :

$$e\phi_{Fi} = k_B T \ln \left( \frac{n}{n_i} \right) = -k_B T \ln \left( \frac{p}{n_i} \right) \quad (\text{IV .70})$$



*Figure IV.5 : Position du niveau de Fermi dans les différents types de Semiconducteur*

**IV.2.4.1. Evolution du niveau de Fermi  $E_{FN}(T)$  en fonction de la température**

Lorsque la température du semiconducteur est abaissée, les densités de donneurs ou d'accepteurs ionisés diminuent progressivement de même que les densités de porteurs libres. La densité de donneurs neutres  $N_d^0$  est donnée par le produit de la densité de donneurs  $N_d$  par la probabilité d'occupation de l'état d'énergie associé au donneur

$$N_d^0 = N_d \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp \left[ \frac{(E_d - E_F)}{k_B T} \right]} \quad (\text{IV .71})$$

où  $E_d$  représente l'énergie de l'état associé au donneur. Le facteur 1/2 qui apparaît au dénominateur de l'expression (IV .71) résulte de la spécificité de l'état donneur.

Le donneur est analogue à l'atome d'hydrogène, son état fondamental est un état 1s deux fois dégénéré, mais la répulsion coulombienne électron-électron interdit que cet état soit occupé par deux électrons.

La densité de donneurs ionisés est donnée par

$$N_d^+ = N_d - N_d^0 = N_d \frac{1}{1 + 2 \exp \left[ \frac{(E_F - E_d)}{k_B T} \right]} \quad (\text{IV .72})$$

De la même manière la densité d'accepteurs ionisés, c'est-à-dire occupés par un électron s'écrit

$$N_a^- = N_a \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \exp \left[ \frac{(E_a - E_f)}{k_B T} \right]} \quad (\text{IV .73})$$

En raison de la dégénérescence du sommet de la bande de valence, le degré de dégénérescence de l'état fondamental de l'accepteur est 4 dans les semiconducteurs cubiques, mais cet état ne peut être occupé que par un seul électron.

Considérons le cas d'un semiconducteur de type n, non dégénéré et dépourvu d'accepteurs. L'équation de neutralité électrique s'écrit  $n - p = N_d^+$

En explicitant  $N_d^+$  à partir de l'expression (IV .72) et n et p à partir des expressions (IV .63-62), cette condition s'écrit

$$N_c \exp\left[\frac{-(E_c - E_F)}{k_B T}\right] - N_v \exp\left[\frac{(E_v - E_F)}{k_B T}\right] = \frac{N_d}{1 + 2 \exp\left[\frac{(E_F - E_d)}{k_B T}\right]}$$

Il faut résoudre cette équation pour calculer d'abord  $E_F(T)$  et ensuite  $n(T)$  et  $p(T)$ .

### a. Niveau de Fermi

Afin de simplifier les calculs et de disposer d'expressions analytiques simples, nous pouvons définir différents régimes de température. A basse température la densité d'électrons est conditionnée par la population du niveau donneur, la densité de trous est négligeable. Lorsque la température augmente les donneurs s'ionisent progressivement, la densité d'électrons devient de l'ordre de  $N_d$ , la densité de trous devient de l'ordre de  $n_i^2/N_d$ .

Il en résulte que la densité de trous reste négligeable tant que  $n_i$  n'est pas de l'ordre de  $N_d$ . Or  $n_i$  est donné par l'expression (IV.39) de sorte que la condition  $N_d \ll n_i$  se traduit par

$$k_B T \ll \frac{E_g}{2 \ln[(N_c N_v)^{1/2} / N_d]} \quad (\text{IV .75})$$

Pour  $N_c \approx N_v \approx 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  et  $N_d \approx 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ,  $n_i$  devient de l'ordre de  $N_d$ . Nous fixerons à cette valeur la limite de température au-dessous de laquelle on peut négliger la densité de trous. L'équation (IV .75) s'écrit alors

$$N_c \exp\left[-\frac{(E_c - E_F)}{k_B T}\right] - N_d \frac{1}{1 + 2 \exp\left[\frac{(E_F - E_d)}{k_B T}\right]} = 0 \quad (\text{IV .76})$$

$$N_c \exp\left[\frac{(E_F - E_d)}{k_B T}\right] \exp\left[\frac{(E_d - E_c)}{k_B T}\right] + 2 N_c \exp\left[\frac{(E_F - E_d)}{k_B T}\right] \exp\left[\frac{(E_d - E_c)}{k_B T}\right] - N_d = 0 \quad (\text{IV .77})$$

En multipliant par  $\frac{1}{2N_c} \exp\left[\frac{(E_c - E_d)}{k_B T}\right]$ , on obtient une équation du second degré de la forme

$$\left(\exp\left[\frac{(E_d - E_c)}{k_B T}\right]\right)^2 + \frac{1}{2} \left(\exp\left[\frac{(E_F - E_d)}{k_B T}\right]\right) - \frac{1}{2} \frac{N_d}{N_c} \frac{(E_c - E_d)}{k_B T} = 0 \quad (\text{IV .78})$$

La racine positive de cette expression ( $e^x > 0$ ) s'écrit

$$\exp\left[\frac{(E_F - E_d)}{k_B T}\right] = \frac{1}{4} \left[ -1 + \left[ 1 + \frac{8N_d}{N_c} \exp\left[\frac{(E_c - E_d)}{k_B T}\right] \right]^{1/2} \right] \quad (\text{IV .79})$$

Et l'expression du niveau de Fermi en fonction de la température se déduit :

$$(\text{IV .80})$$

$$E_F = E_d + k_B T \ln \left\{ \frac{1}{4} \left[ -1 + \left[ 1 + \frac{8N_d}{N_c} \exp \left[ \frac{(E_c - E_d)}{k_B T} \right] \right]^{1/2} \right] \right\}$$

Pour étudier la variation de  $E_F$  dans cette gamme de température définie par  $k_B T < E_g/10$ , on peut considérer deux régions différentes :

- **cas  $k_B T \ll E_c - E_d$**

On peut négliger 1 sous la racine et -1 devant la racine. On obtient alors une expression de  $E_F$  valable aux très basses températures

$$E_F = \frac{E_c + E_d}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \left( \frac{N_d}{2N_c} \right) \quad (\text{IV .81})$$

Cette expression est comparable à l'expression (IV.41) en remplaçant  $E_v$  par  $E_d$  et  $N_v$  par  $N_d/2$ , le niveau donneur joue le rôle que jouait la bande de valence dans le matériau intrinsèque.

Quand la température tend vers zéro,  $k_B T \rightarrow 0$  et  $\ln \left( \frac{N_d}{2N_c} \right) \rightarrow \infty$  car  $N_c$  varie comme  $T^{3/2}$

Mais la puissance l'emporte sur le logarithme de sorte que le deuxième terme de l'expression (IV .81) tend vers zéro. Il en résulte qu'au zéro absolu le niveau de Fermi est donné par

$$E_F = \frac{E_c + E_d}{2} \quad (\text{IV .82})$$

Le niveau de Fermi est situé au milieu entre la bande de conduction et le niveau donneur. On retrouve l'analogie citée plus haut avec le semiconducteur intrinsèque dans lequel au zéro degré absolu le niveau de Fermi est situé au milieu du gap.

Quand la température augmente à partir de  $T = 0$ , le niveau de Fermi s'élève tant que  $N_c$  qui varie comme  $T^{3/2}$  (Eq. IV.10), est inférieur à  $N_d$ . Il passe par un maximum pour  $N_c = N_d$  puis descend.

- **cas  $k_B T \gg E_c - E_d$**  Dans cette gamme de température, on peut utiliser un développement limité de la racine dans l'expression (IV .80) et on obtient

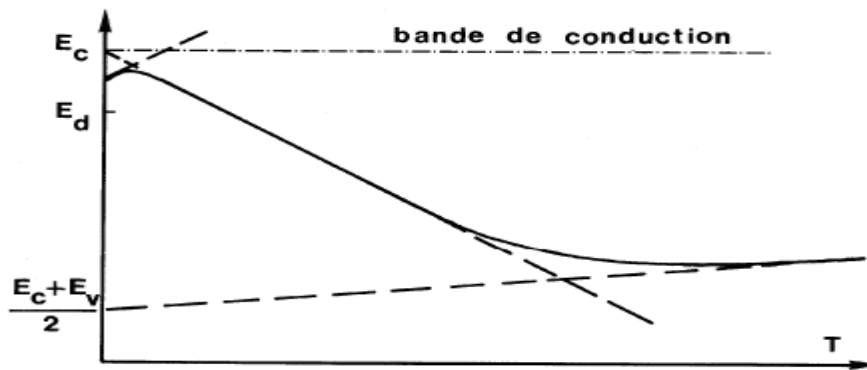
$$E_F = E_c - \frac{k_B T}{2} \ln \left( \frac{N_c}{N_d} \right) \quad (\text{IV .83})$$

Dans cette gamme de température, qui contient la température ambiante pour la plupart des semiconducteurs, la densité équivalente d'états est supérieure à la densité de donneurs de sorte  $\ln \left( \frac{N_c}{N_d} \right)$  que est positif. Il en résulte que le niveau de Fermi descend suivant une loi en température pratiquement linéaire.



Lorsque la température devient supérieure à  $E_g/10$ , l'approximation précédente n'est plus justifiée et on ne peut plus négliger la densité de trous.

La densité de porteurs intrinsèques  $n_i$  devient d'abord comparable puis supérieure à la densité de donneurs. Lorsque la condition  $n_i \gg N_d$  est satisfaite, on tend vers un régime dans lequel les porteurs intrinsèques jouent le rôle essentiel, les donneurs deviennent négligeables. Ce régime est appelé régime intrinsèque. Le niveau de Fermi est alors donné par l'expression (IV.41). Il monte avec la température si  $N_v > N_c$  il descend dans le cas contraire. A partir des expressions (IV .81, IV .81 et IV.41), on peut tracer l'allure de la courbe de variations de  $E_F$  avec la température (Fig. IV.6).



*Figure VI.6: Evolution de niveau de Fermi en fonction de la température*

#### IV.2.4.2. Evolution des densités d'électrons et de trous en fonction de la température :

(Cas d'une ionisation partielle des atomes du dopage N)

##### a. Région des très basses températures ( $k_B T \ll (E_c - E_d)$ )

Dans cet intervalle de températures, le niveau de Fermi est donné par l'expression précédente :

$$E_F = \frac{E_c + E_d}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \left( \frac{N_d}{2N_c} \right) \quad (\text{IV .84})$$

La relation s'écrit aussi sous forme :

$$\frac{E_F + E_c}{k_B T} = \frac{-E_c + E_d}{2k_B T} + \ln \left( \frac{N_d}{2N_c} \right)^{1/2} \quad (\text{IV .85})$$

$$-\frac{(E_F + E_c)}{k_B T} = \frac{-E_c + E_d}{2k_B T} + \ln \left( \frac{N_d}{2N_c} \right)^{1/2} \quad (\text{IV .86})$$

La densité d'électrons  $n(T)$  est donnée par les relations précédentes :

$$(\text{IV .87})$$

$$n(T) = N_c \exp \left[ \frac{-(E_c - E_F)}{k_B T} \right] = N_c \exp \left[ \frac{-(E_c - E_d)}{2k_B T} \right] + \ln \left( \frac{N_d}{2N_c} \right)^{1/2}$$

$$n(T) = \left( \frac{N_c N_d}{2} \right)^{1/2} \exp \left[ \frac{-(E_c - E_d)}{2k_B T} \right]$$

D'après la relation, ce régime est comparable au régime intrinsèque dans lequel  $N_d/2$  (remplace  $N_v$  et  $(E_c - E_d)$  remplace  $(E_g = E_c - E_v)$ ). La densité varie linéairement en fonction de  $(1/T)$  avec une pente de  $(-\frac{E_c - E_d}{2})$ , figure (IV.6).

Lorsque la température tend vers zéro, tous les donneurs deviennent neutres, c'est le régime de gel des électrons.

### b. Région des basses températures (Régime qui contient à température ambiante)

Le niveau de Fermi est donné par la relation suivante :

$$E_F = E_c - k_B T \ln \left( \frac{N_c}{N_d} \right) \quad (\text{IV .89})$$

L'équation s'écrit aussi :

$$-\frac{(E_c - E_F)}{k_B T} = -\ln \left( \frac{N_c}{N_d} \right) \quad (\text{IV .90})$$

La densité d'électrons est :

$$n(T) = N_c \exp \left[ -\frac{(E_c - E_F)}{k_B T} \right] = N_c \exp - \left( \ln \left( \frac{N_c}{N_d} \right) \right) \quad n(T) = N_d \quad (\text{IV .91})$$

La densité d'électrons à basse température est égale à la densité de donneurs. L'énergie thermique est suffisante pour ioniser tous les donneurs mais insuffisante pour créer un nombre conséquent de porteurs intrinsèques.

Ce régime est appelé régime d'épuisement des donneurs.

### c. Région des hautes températures ( $k_B T \gg (E_c - E_d)$ ):

A des températures élevées, le régime est intrinsèque. Les donneurs ne jouent aucun rôle significatif. Le niveau de Fermi est exprimé par la relation :

$$E_F = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \left( \frac{N_v}{N_c} \right) \quad (\text{IV .92})$$

La densité de porteurs est :

$$(\text{IV .93})$$

$$n = p = n_i = (N_c N_v)^{1/2} \exp\left[-\frac{E_g}{2k_B T}\right]$$

Sur une échelle logarithmique, la densité de porteurs varie linéairement en fonction de  $(1/T)$  la pente est égale à  $(-E_g/2)$ , figure (IV.7).

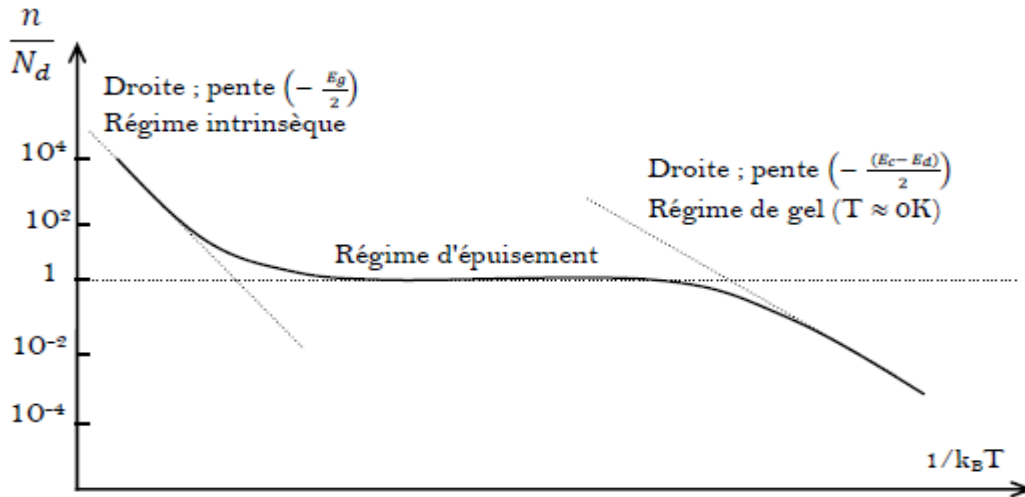


Figure IV.7 : Evolution de la densité en fonction de la température

La figure IV.8 donne une représentation schématique des trois régimes de fonctionnement en termes de bandes d'énergie

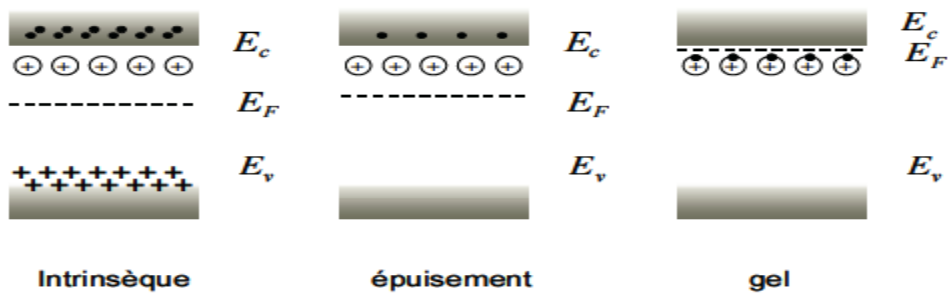


Figure IV.8: Les régimes de fonctionnement

## Chapitre V : Semiconducteur hors équilibre

Dans ce chapitre, les équations décrivant le mouvement des charges, ainsi que les relations entre la charge, le champ électrique et potentiel, sera dérivé. Les électrons et les trous ne sont plus traités séparément, mais sont considérés comme des populations macroscopiques de porteurs ou concentrations de porteurs.

En conséquence, l'utilisation de la mécanique quantique n'est pas plus nécessaire. Au contraire, les équations et concepts de Maxwell tels que conservation de la charge et de la diffusion résultant de la concentration des dégradés seront utilisés.

Un champ électrique appliqué à un semi-conducteur produira une force sur les électrons et trous pour qu'ils subissent une accélération nette et un mouvement net, à condition qu'il existe des états d'énergie disponibles dans les bandes de conduction et de valence. Ce mouvement net de charge due à un champ électrique est appelées courants de diffusion dérive.

### V.1. Densité du courant de dérive

Si nous avons une densité de charge volumique positive se déplaçant à une vitesse de dérive moyenne  $V_d$ , la densité du courant de dérive est donnée par :

( V .1)

$$J_d = \rho v_d$$

En termes d'unités, nous avons :  $J_d = \left(\frac{\text{Coul}}{\text{cm}^3}\right) \cdot \left(\frac{\text{cm}}{\text{s}}\right) = \frac{\text{Coul}}{\text{cm}^2 \cdot \text{s}} = \frac{\text{A}}{\text{cm}^2}$

Si la densité de charge volumique est due à des trous chargés positivement, alors :

$$J_{p/d} = (e q)v_d \tag{ V .2}$$

où  $J_{pd}$  est la densité de courant de dérive due aux trous et  $V_{dp}$  est la vitesse moyenne de dérive des trous.

L'équation du mouvement d'un trou chargé positivement en présence d'un le champ est :

$$F = m_{cp}^* a = eE \tag{ V .3}$$

où  $e$  : est la charge électronique,  $a$  :est l'accélération,  $E$  est le champ électrique,

$m_{cp}^*$  est la masse effective de conductivité du trou

Si le champ est constant, alors nous nous attendons à ce que la vitesse augmente linéairement avec le temps. Cependant, des particules chargées dans un semi-conducteur sont impliquées dans des collisions avec une impuretés ionisées et tous les imperfections cristallines et avec les vibrations du (phonos) Ces collisions, modifient les caractéristiques de vitesse de la particule.

Au fur et à mesure que le trou accélère dans un cristal en raison du champ électrique, la vitesse augmente.

Lorsque la particule chargée entre en collision avec un atome dans le cristal, par exemple, la particule perd une partie ou la totalité de son énergie. La particule recommencera à accélérer et à gagner l'énergie jusqu'à ce qu'elle soit à nouveau impliquée dans un processus de diffusion.

Tout au long de ce processus, la particule gagnera une vitesse de dérive moyenne qui, pour les champs électriques faibles, est directement proportionnelle au champ électrique.

On peut alors écrire : 
$$v_{dp} = \mu_p E \quad (\text{V.4})$$

où  $\mu_p$  est le facteur de proportionnalité et s'appelle la mobilité du trou. La mobilité est un paramètre important du semi-conducteur car il décrit à quel point une particule se déplacera à cause d'un champ électrique. L'unité de mobilité est généralement exprimée en termes de  $\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ .

En combinant les équations (V.2) et (V.4), nous pouvons écrire la densité du courant de dérive des trous.

$$J_{p/d} = (e p) v_{dp} = e \mu_p p E \quad (\text{V.5})$$

**Tableau V.1 Valeurs de mobilités des électrons et des trous typiques à  $T = 300 \text{ K}$  et faible**

	<b>Electrons</b> $\mu_n (\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	<b>Trous</b> $\mu_p (\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$
<b>Silicium</b>	1350	480
<b>Germanium</b>	3900	1900
<b>Arséniure de Galium</b>	8500	400

*dopage les concentrations*

Le courant de dérive dû aux trous est dans le même sens que le champ électrique appliqué.

De même pour la dérive s'applique aux électrons. Nous pouvons écrire :

$$J_{n/d} = \rho v_{dn} (-e p) v_{dn} \quad (\text{V.6})$$

où  $J_{nd}$  : est la densité de courant de dérive due aux électrons

$V_{dn}$  : est la dérive moyenne vitesse des électrons.

La densité de charge nette des électrons est négative.

La vitesse moyenne de dérive d'un électron est également proportionnelle au champ électrique pour les petits champs. Cependant, puisque l'électron est chargé négativement, le mouvement net de l'électron est opposé à la direction du champ électrique. On peut alors écrire :

( V .7)

$$v_{dn} = -\mu_n E$$

où  $\mu_n$  est la mobilité des électrons est une quantité positive. L'équation (v.6) peut maintenant être écrite comme :

$$J_{n/d} = (-e n)(-\mu_n E) = e\mu_n nE \quad ( V .8)$$

Le courant de dérive conventionnel dû aux électrons est également dans le même sens que le champ électrique appliqué même si le mouvement de l'électron est dans la direction opposée. La mobilité des électrons et des trous est fonction de la température et des concentrations de dopage, comme nous le verrons dans la section suivante.

Le tableau V.1 montre des valeurs typique de  $\mu_n$  et  $\mu_p$  à  $T=300$  K pour de faibles concentrations de dopage, dans certains semi-conducteurs .

Étant donné que les électrons et les trous contribuent au courant de dérive, le courant de dérive total la densité est la somme des densités de courant de dérive d'électrons et de trous individuels, nous pouvons donc écrire :

$$J_d = e(\mu_n n + \mu_p p)E \quad ( V .9)$$

### V.1.2 Effets sur la mobilité

Dans la section précédente, nous avons défini la mobilité, qui relie la vitesse de dérive moyenne d'un porteur au champ électrique. Les mobilités des électrons et des trous sont des semi-conducteurs importants paramètres dans la caractérisation de la dérive des porteurs, comme on le voit dans l'équation (V.9).

L'équation (V.3) liait l'accélération d'un trou à une force telle qu'une force électrique champ. Nous pouvons écrire cette équation comme :

$$F = m_{cp}^* \frac{dv}{dt} = eE \quad ( V .10)$$

où  $v$  est la vitesse de la particule due au champ électrique et n'inclut pas la vitesse thermique aléatoire.

Si nous supposons que la masse effective du porteur de charge de conductivité et champ électrique sont des constantes, alors nous pouvons intégrer l'équation (V.10) et obtenir  $V$  en supposant que la vitesse de dérive initiale est nulle. ( $V_0 = 0$ ).

$$v = \frac{eE t}{m_{cp}^*} \quad (\text{V.11})$$

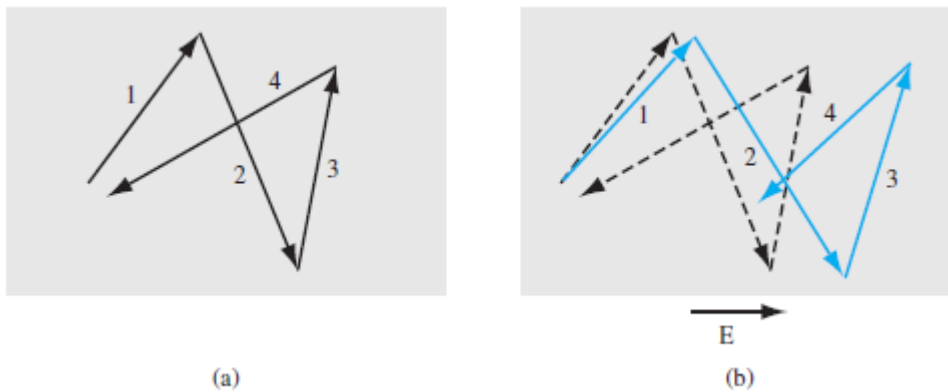
La figure (V.1a) montre un modèle schématisé de la vitesse thermique et du mouvement aléatoire d'un trou dans un semi-conducteur à champ électrique nul.

Il y a un temps moyen entre collisions qui peut être désigné par  $\tau_{cp}$ .

Si un petit champ électrique (champ  $\vec{E}$ ) est appliqué comme indiqué sur la figure (V.1b), il y aura une dérive nette du trou dans la direction du champ  $\vec{E}$ , et la vitesse de dérive nette sera une petite perturbation sur la vitesse thermique aléatoire, de sorte que le temps entre les collisions ne sera pas sensiblement modifié.

Si nous utilisons le temps moyen entre les collisions  $\tau_{cp}$  à la place du temps  $t$  dans l'équation (V.11), puis la vitesse moyenne juste avant une collision ou une diffusion l'événement est :

$$v_{d/p} = \left( \frac{e \tau_{cp}}{m_{cp}^*} \right) E \quad (\text{V.12})$$



**Figure V.1 Comportement aléatoire typique d'un trou dans un semi-conducteur**  
(a) sans champ électrique et (b) avec un champ électrique.

La vitesse de dérive moyenne est la moitié de la valeur de crête afin que nous puissions écrire :

$$\langle v_d \rangle = \frac{1}{2} \left( \frac{e \tau_{cp}}{m_{cp}^*} \right) E \quad (\text{V.13})$$



Cependant, le processus de collision n'est pas aussi simple que ce modèle, mais est statistique **par** nature.

Dans un modèle plus précis incluant l'effet d'une distribution statistique, le facteur (1/2) dans l'équation (V.12b) n'apparaît pas. La mobilité du trou est alors donnée par :

$$\mu_p = \frac{v_{dp}}{E} = \frac{e \tau_{cp}}{m_{cp}^*} \quad (\text{V.13})$$

La même analyse s'applique aux électrons; ainsi, nous pouvons écrire la mobilité électronique comme :

$$\mu_n = \frac{v_{dn}}{E} = \frac{e \tau_{cn}}{m_{cn}^*} \quad (\text{V.14})$$

$m_{cn}^*$  est la masse effective de conductivité pour les électrons

où  $\tau_{cn}$  est le temps moyen entre les collisions pour un électron.

### V.1.3 Conductivité des électrons et les trous

La densité de courant de dérive, donnée par l'équation (V.9), peut s'écrire :  $\vec{J}$ ,

$$J_d = e(\mu_n n + \mu_p p)E = \sigma E \quad (\text{V.15})$$

où  $\sigma$  est la conductivité du matériau semi-conducteur. La conductivité est donnée en  $(\Omega \cdot \text{cm})^{-1}$  et est fonction des concentrations d'électrons et de trous et des mobilités.

On vient alors aussi de voir que les mobilités sont des concentrations des impuretés phonons (donc de T); la conductivité est une fonction quelque peu compliquée de pendant de ces concentrations, de l'impureté et des phonons.

L'inverse de la conductivité est la résistivité, qui est désignée par  $\rho$  et est donnée en unités  $(\Omega \cdot \text{cm})$ . Nous pouvons écrire la formule de résistivité comme :

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{e(\mu_n n + \mu_p p)} \quad (\text{V.16})$$

Pour un matériau intrinsèque, la conductivité peut s'écrire :

$$\sigma_i = e(\mu_n + \mu_p)n_i \quad (\text{V.17})$$

Les concentrations d'électrons et de trous sont égales dans un semi-conducteur intrinsèque, donc la conductivité intrinsèque comprend à la fois la mobilité des électrons et des trous. Comme, en général, les mobilités des électrons et des trous ne sont pas égales.

### V.1.4 Loi d'Ohm

La relation  $J = \sigma E$ , qui s'écrit aussi  $\rho = 1/\sigma$  ou  $\rho$  est la résistivité du matériau, n'est autre que l'écriture microscopique de la loi d'Ohm. En l'intégrant sur un barreau semiconducteur homogène de longueur finie  $l$  et de section finie  $s$ , on obtient la loi

$$V = R I \text{ ou } V = E l, I = J.S \quad R = \rho \frac{l}{s}$$

### c. Relations d'Einstein

La constante diffusion  $D$  et la mobilité  $\mu$  d'un type de porteur traduisent l'aptitude des porteurs à se déplacer dans le réseau cristallin sous l'action d'une force. Dans le premier cas la force résulte d'un gradient de concentration, dans le second elle résulte d'un gradient de potentiel. Ces deux quantités ne sont donc pas indépendantes.

Considérons un barreau semiconducteur isolé à l'équilibre thermodynamique le niveau de Fermi est horizontal. En effet si aucune tension n'est appliquée.

Si la densité d'électrons est homogène, elle est donnée par l'expression (II .11), si elle n'est pas homogène suivant la direction  $x$ , elle est donnée par :

$$n(x) = N_c \exp\left(-\frac{E_c(x) - E_F}{k_B T}\right) \quad (\text{V} .18)$$

L'inhomogénéité de la densité d'électrons entraîne l'existence d'une force de diffusion et d'un champ électrique, qui créent un courant de conduction et un courant de diffusion. Le barreau étant isolé le courant résultant est nul, en d'autres termes le courant de diffusion est équilibré par le courant de conduction :

$$n(x)e\mu_n E(x) + eD_n \frac{dn(x)}{dx} = 0 \quad (\text{V} .19)$$

Le champ  $E(x)$  résulte du gradient de concentration, on peut donc le calculer en fonction de  $dn(x)/dx$  Si on appelle  $V(x)$  le potentiel au point  $x$ , on peut écrire :

$$E(x) = -\frac{dV(x)}{dx} = \frac{1}{e} \frac{dE_c(x)}{dx} \quad (\text{V} .20)$$

Cette relation amène quelques précisions. Les électrons situés en bas de la bande de conduction ont une énergie cinétique nulle. En effet, la vitesse définie par :  $v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}$  est nulle

par définition du bas de la bande de conduction. L'énergie des électrons est donc strictement potentielle ce qui permet d'écrire la relation (V .19).

$$\frac{dE_c(x)}{dx} = \frac{dE_c(x)}{dn(x)} \frac{dn(x)}{dx} \quad (\text{V .21})$$

En dérivant l'expression (V .18). on obtient :

$$\frac{dn(x)}{dE_c(x)} = -\frac{1}{k_B T} n(x) \quad (\text{V .22})$$

Le champ électrique s'écrit donc :

$$E(x) = -\frac{k_B T}{e} \frac{1}{n(x)} \frac{dn(x)}{dE_c(x)} \quad (\text{V .23})$$

En explicitant E(x) dans l'expression du courant total on obtient :

$$e\mu_n k_B T + eD_n = 0 \quad (\text{V .24})$$

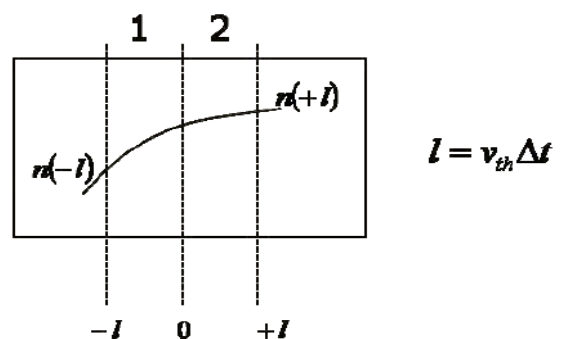
On obtiendrait une relation équivalente avec les trous, c'est la relation d'Einstein qui s'écrit :

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{D_p}{\mu_p} = \frac{k_B T}{e} \quad (\text{V .25})$$

Il faut noter que la relation d'Einstein a été établie à partir de l'expression ((V .18) qui résulte de l'approximation de Boltzmann, justifiée uniquement dans un semiconducteur non dégénéré. Il en résulte que cette relation n'est plus valable dans un semiconducteur dégénéré.

### V.1.5 Le courant de diffusion

Dans le cas de la diffusion (figure V.2), la densité varie rapidement de part et d'autre de la surface. Les électrons supposés soumis à une forte agitation thermique traversent la surface dans les deux sens avec des vitesses variables. Pour simplifier considérons un cas à une dimension et donc deux flux de sens opposés.



*Figure V.2 Le courant de diffusion*

On considère que tous les électrons ont la même vitesse en valeur absolue  $v_{th}$ . Les deux flux pendant un intervalle de temps  $\Delta t$  correspondant aux charges comprises entre  $-v_{th} \Delta t$  et  $v_{th}$  sont donc, l'origine des distances étant au niveau de la surface :

$$I_1 = \frac{1}{2} n (-v_{th} \Delta t) \cdot v_{th} \cdot e \quad (\text{V.26})$$

$$I_2 = \frac{1}{2} n (v_{th} \Delta t) \cdot v_{th} \cdot e \quad (\text{V.27})$$

$$(\text{V.28})$$

$$J = \frac{1}{2} n (v_{th} \Delta t) \cdot v_{th} \cdot e - \frac{1}{2} n (-v_{th} \Delta t) \cdot v_{th} \cdot e$$

Un simple développement limité conduit à

$$J = \frac{1}{2} \frac{dn}{dx} 2v_{th} \Delta t \cdot e \cdot v_{th} \quad (\text{V.29})$$

Le choix de  $\Delta t$  peut se faire en se limitant aux électrons qui n'ont pas subi de collisions. C'est donc le temps de collision qui est défini par :  $\tau$ . On obtient alors :

$$J = e D_n \frac{dn}{dx} \quad (\text{V.30})$$

$$D_n = v_{th}^2 \tau_c \quad (\text{V.31})$$

Ce résultat se généralise à trois dimensions pour donner la loi de Fick.

Lorsque les porteurs libres ne sont pas distribués uniformément dans le semiconducteur il sont soumis au processus général de diffusion. Leur mouvement s'effectue dans un sens qui tend à uniformiser leur distribution spatiale.

Le flux de porteurs est, conformément à la première loi de Fick, proportionnel à leur gradient de concentration. Si on appelle  $n dx$  le nombre d'électrons qui diffusent par seconde dans la direction  $ox$ , à travers l'unité de surface perpendiculaire à  $ox$ , la loi de Fick s'écrit :

$$n_x^d = -D_n \frac{dn}{dx} \quad (\text{V.32.a})$$

$$p_x^d = -D_p \frac{dp}{dx} \quad (\text{V.32.b})$$

Les constantes  $D_n$  et  $D_p$  sont appelées constantes de diffusion des électrons et des trous respectivement. Le signe moins traduit le fait que les porteurs diffusent dans la direction de plus faible concentration. A trois dimensions les flux de porteurs s'écrivent :

$$(\text{V.33.a})$$

$$(\text{V.33.b})$$

$$n^d = -D_n \text{grad } n$$

$$p^d = -D_p \text{grad } p$$

Aux déplacements des porteurs de charge correspondent des courants appelés courants de diffusion :

$$J_{dn} = eD_n \text{grad } n \quad (\text{ V .34.a})$$

$$J_{dp} = -eD_p \text{grad } p \quad (\text{ V .34.b})$$

Le courant total de diffusion s'écrit donc :

$$J_d = eD_n \text{grad } n - eD_p \text{grad } p \quad (\text{ V .35})$$

On obtient donc pour le courant total (courant de diffusion et courant de conduction):

$$J_n = ne\mu_n E + eD_n \text{grad } n \quad (\text{ V .36.a})$$

$$J_p = pe\mu_p E - eD_p \text{grad } p \quad (\text{ V .36.b})$$

## V.2 Phénomène de Génération-Recombinaison

On caractérise la création de porteurs dans le semiconducteur par un paramètre qui mesure le nombre de porteurs créés par unité de volume et unité de temps,  $g'$  ( $cm^{-3} \cdot s^{-1}$ ).

On caractérise la recombinaison des porteurs par un paramètre qui mesure le nombre de porteurs qui disparaissent par unité de volume et unité de temps,  $r'$  ( $cm^{-3} \cdot s^{-1}$ ).

Le paramètre  $g'$  résulte de la contribution de deux types de génération de porteurs. Il existe d'une part les générations spontanées dues à l'agitation thermique, que l'on caractérisera par un paramètre  $g_{th}$  que nous appellerons taux de génération thermique.

$$g' = g + g_{th} \quad (\text{ V .37})$$

Il existe d'autre part les générations résultant de l'excitation du semiconducteur par une source extérieure. Ces générations peuvent résulter d'une excitation optique, d'une irradiation par des particules, d'un champ électrique intense, d'une injection électrique.

Ce type de génération sera caractérisé par un paramètre  $g$ , qui est spécifique du processus mis en jeu.

Le paramètre  $r'$  est fonction des processus qui dans le semiconducteur, régissent la recombinaison des porteurs excédentaires. C'est un paramètre qui est propre au matériau.

La variation du nombre de porteurs par unité de volume et unité de temps, due aux processus de génération-recombinaison, s'écrit :

$$\left(\frac{dn}{dt}\right)_{gr} = g' - r' = g + g_{th} - r' \quad (\text{V.38})$$

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

$g_{th}, r'$  : paramètres spécifiques au matériau à une température donnée :

$$r = r' - g_{th} \quad (\text{V.39})$$

on pose :  $r$  ; représente donc le bilan entre les recombinaisons et les générations thermiques :

$$\left(\frac{dn}{dt}\right)_{gr} = g - r \quad (\text{V.40})$$

$g$  et  $r$  sont respectivement appelés taux de génération et taux de recombinaison des porteurs. Le taux de génération est spécifique du processus mis en jeu dans l'excitation du semiconducteur, nous l'explicitons en temps utile.

Nous allons traiter ici plus particulièrement du taux de recombinaison, qui est un paramètre spécifique du matériau.

La recombinaison d'un électron avec un trou, dans le semiconducteur, peut se produire soit directement par la rencontre des deux particules, soit indirectement par l'intermédiaire d'une impureté qui joue en quelque sorte le rôle d'agent de liaison.

### V. 2.1. Recombinaison directe (électron – trou)

Le nombre de recombinaisons directes électron-trou est proportionnel d'une part au nombre d'électrons et d'autre part au nombre de trous. De plus, le nombre d'électrons qui se recombinent est égal, et pour cause, au nombre de trous qui se recombinent, soit :

$$r'_p = r'_n = r' = k n p \quad (\text{V.41})$$

Avec  $k$  : constante de proportionnalité.

Le taux de recombinaison s'écrit donc :

$$r_n = r_p = r = r' - g_{th} = k n p - g_{th} \quad (\text{V.42})$$

A l'équilibre thermodynamique, c'est-à-dire en l'absence de toute excitation extérieure,

$n = n_0$ ,  $p = p_0$  et  $r = 0$ . Ainsi  $kn_0 p_0 - g_{th} = 0$  et par suite  $g_{th} = k n_i^2$ . Le taux de recombinaison s'écrit donc :

$$r = k (n p - n_i^2) \quad (\text{V.43})$$

En régime hors équilibre  $n = n_0 + \Delta n$ ,  $p = p_0 + \Delta p$ , avec, en raison de la condition de neutralité électrique,  $\Delta n = \Delta p$ . L'expression précédente s'écrit alors :

$$r = k[(n_0 + \Delta n)(p_0 + \Delta p) - n_i^2] \quad (\text{V.44})$$

$$r = k[(n_0 \Delta p + p_0 \Delta n + \Delta n \Delta p + n_0 p_0 - n_i^2)] \quad (\text{V.45})$$

$$r = k[(n_0 \Delta p + p_0 \Delta n + \Delta n \Delta p)] \quad (\text{V.46})$$

$$r = k[n_0 + p_0 + \Delta n] \Delta n = k[n_0 + p_0 + \Delta p] \Delta p \quad (\text{V.47})$$

On écrit cette expression sous la forme :

$$r = \frac{\Delta n}{\tau(\Delta n)} = \frac{\Delta p}{\tau(\Delta p)} \quad (\text{V.48})$$

avec :

$$\tau(\Delta n) = \frac{1}{k[n_0 + p_0 + \Delta n]} \quad (\text{V.49})$$

$\tau(\Delta n)$ : est appelé durée de vie des porteurs dans le semiconducteur excité.

Ce paramètre n'est pas spécifique du semiconducteur dans la mesure où il est fonction de l'excitation par le terme  $\Delta n$ . En fait, sauf cas spécifiques que nous discuterons en temps utile, les composants fonctionnent dans un régime que l'on qualifie de faible injection. Ce régime est défini par la condition,  $\Delta n = \Delta p \ll n_0$  ou  $p_0$  ou  $\Delta n = \Delta p$ .

En d'autres termes un excès de porteurs par rapport au régime d'équilibre est faible devant la densité de porteurs majoritaires du semiconducteur.

Dans le cas d'un semiconducteur de type (p) en régime faible injection, la densité intrinsèque  $n_0$  est très faible devant  $p_0$ .

$$p_0 \gg n_0 \text{ et } \Delta n = \Delta p \ll p_0 \quad (\text{V.50})$$

$$n = n_0 + \Delta n, p = p_0 + \Delta p \approx p_0 \quad (\text{V.51})$$

Il en résulte que :

$$\tau \approx \frac{1}{k p_0} \text{ et } r \approx \frac{\Delta n}{\tau} \quad (\text{V .52})$$

Dans le cas d'un semiconducteur de type (N) en régime de faible injection, la densité intrinsèque  $p_0$  est très faible devant  $n_0$  :

$$n_0 \gg p_0 \text{ et } \Delta n = \Delta p \ll n_0 \quad (\text{V .53})$$

$$n = n_0 + \Delta n \approx n_0, p = p_0 + \Delta p \quad (\text{V .54})$$

Il en résulte que :

$$\tau \approx \frac{1}{k n_0} \text{ et } r \approx \frac{\Delta p}{\tau} \quad (\text{V .55})$$

En résumé dans un matériau dopé et en régime de faible injection, on suppose constante la densité de porteurs majoritaires et on écrit le taux de recombinaison des porteurs minoritaires sous la forme :

Pour un semi-conducteurs de type p :  $r_n \approx \frac{\Delta n}{\tau_n} \quad (\text{V .56.a})$

Pour un semi-conducteurs de type n :  $r_p \approx \frac{\Delta p}{\tau_p} \quad (\text{V .56 .b})$

Avec  $\tau_n = \frac{1}{k n_0}$  et  $\tau = \frac{1}{k p_0}$  les durées de vie des porteurs minoritaires.

### V. 2.2 Recombinaison indirecte (centre de recombinaison)

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

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

Soit  $N_R$  la densité de centres de recombinaison,  $E_R$  le niveau d'énergie qu'ils introduisent dans le gap et  $f_R$  la probabilité d'occupation de ce niveau, c'est la fonction de Fermi.

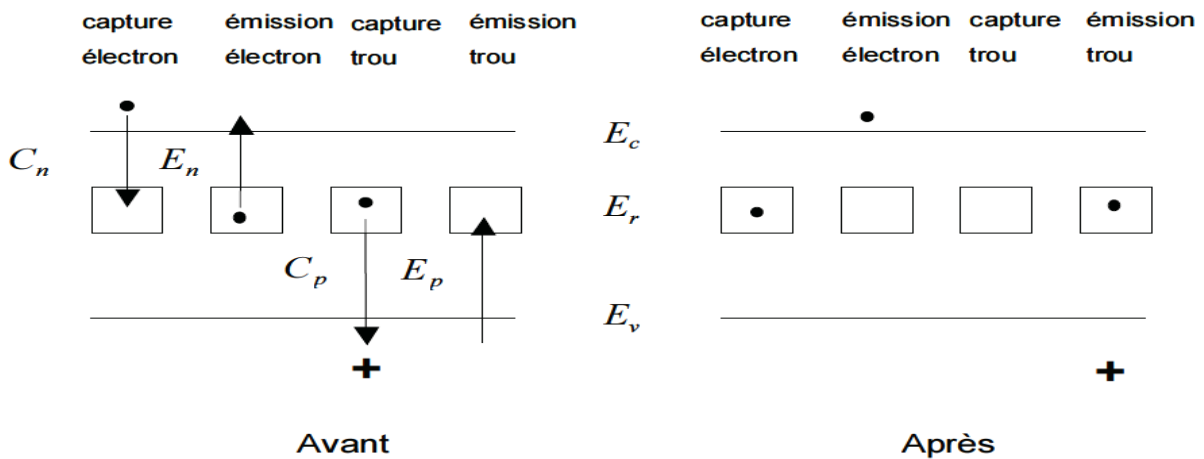


Soient  $C_n, C_p, E_n$  et  $E_p$  les coefficients de capture et d'émission des électrons et des trous par ces centres (Figure V .3).

Les densités de centres occupés  $N_{R0}$  et de centres vides  $N_{RV}$  sont respectivement données par :

$$N_{R0} = N_R \cdot f_R, N_{RV} = N_R \cdot (1 - f_R) \text{ avec :}$$

$$f_R = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_R - E_F}{k_B T}\right)} \quad (\text{ V .57})$$



**Figure V.3 : Centres de recombinaisons**

Les taux de recombinaison des électrons et des trous s'écrivent :

$$r_n = C_n n N_{R0} - E_n N_{R0} \quad (\text{ V .58.a})$$

$$r_p = C_p p N_{R0} - E_p N_{RV} \quad (\text{ V .58.b})$$

Où :

$$r_n = N_R(C_n n (1 - f_R) - E_n f_R) \quad (\text{ V .59.a})$$

$$r_p = N_R(C_p p f_R - E_p(1 - f_R)) \quad (\text{ V .59.b})$$

A l'équilibre thermodynamique  $n = n_0, p = p_0$  et  $r_n = r_p = 0$ , et par suite :

$$E_n = C_n n_0 (1 - f_R) / f_R \quad (\text{ V .60.a})$$

$$E_p = C_p p_0 (1 - f_R) / f_R \quad (\text{ V .60.b})$$

En explicitant  $f_R$  à partir de l'expression (V.57) et  $n_0$  et  $p_0$  les taux d'émission s'écrivent :

$$E_n = C_n n_i \exp\left(\frac{E_R - E_{Fi}}{k_B T}\right) \quad (\text{ V .61.a})$$

$$(\text{ V .61.b})$$

$$E_p = C_p n_i \exp \frac{-(E_R - E_{Fi})}{k_B T}$$

Les taux de recombinaison sont par conséquent donnés par les expressions :

$$r_n = C_n N_R \left( n (1 - f_R) - f_R n_i \exp \frac{(E_R - E_{Fi})}{k_B T} \right) \quad (\text{V.62.a})$$

$$r_p = C_p N_R \left( p f_R - (1 - f_R) n_i \exp \frac{-(E_R - E_{Fi})}{k_B T} \right) \quad (\text{V.62.b})$$

Le centre de recombinaison provoque la recombinaison d'une paire électron-trou de sorte que  $r_n = r_p$ . En écrivant cette égalité on obtient la probabilité d'occupation du centre :

$$f_R = \frac{C_n n + C_p n_i \exp \left( \frac{-(E_R - E_{Fi})}{k_B T} \right)}{C_n \left( n + n_i \exp \left( \frac{(E_R - E_{Fi})}{k_B T} \right) \right) + C_p \left( n + n_i \exp \left( \frac{-(E_R - E_{Fi})}{k_B T} \right) \right)} \quad (\text{V.63})$$

En explicitant  $f_R$  on obtient  $r = r_n = r_p$  :

$$r = C_n C_p N_R \frac{pn - n_i^2}{C_n \left( n + n_i \exp \left( \frac{(E_R - E_{Fi})}{k_B T} \right) \right) + C_p \left( n + n_i \exp \left( \frac{-(E_R - E_{Fi})}{k_B T} \right) \right)} \quad (\text{V.64})$$

En posant :  $\tau_{p0} = 1/C_p N_R$  et  $\tau_{n0} = 1/C_n N_R$

Le taux de recombinaison s'écrit :

$$r = \frac{pn - n_i^2}{\tau_{p0} \left( n + n_i \exp \left( \frac{(E_R - E_{Fi})}{k_B T} \right) \right) + \tau_{n0} \left( n + n_i \exp \left( \frac{-(E_R - E_{Fi})}{k_B T} \right) \right)} \quad (\text{V.65})$$

Dans la pratique les centres qui jouent un rôle important dans les processus de recombinaison introduisent des niveaux d'énergie voisins du milieu du gap du semiconducteur et de plus ont des coefficients de capture tels que  $C_n \approx C_p$ .

Les centres caractérisés par des coefficients de capture d'électrons et de trous très différents jouent davantage le rôle de piège à électron ( $C_n \gg C_p$ ) ou à trous ( $C_p \gg C_n$ )

On peut donc écrire l'expression précédente sous une forme simplifiée en posant :

$$E_R - E_{Fi}, \quad C_n = C_p, \quad \tau_{p0} = \tau_{n0} = \tau_m = 1/CN_R$$

Le taux de recombinaison s'écrit :

$$r = \frac{1}{\tau_m} \left( \frac{pn - n_i^2}{2n_i + p + n} \right) \quad (\text{V.66})$$

### V.2.2.1 Semiconducteur de type n

Dans ce cas d'une faible excitation :

$$n_0 \gg n_i \gg p_0 \text{ et } n = n_0 + \Delta n \approx n_0 \text{ et aussi } p = p_0 + \Delta p \ll n_0$$

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

$$r = \frac{1}{\tau_m} \left( \frac{pn - n_i^2}{n} \right) = \frac{p - n_i^2/n}{\tau_m} = \frac{p - p_0}{\tau_m} \quad r = \frac{\Delta p}{\tau_m}$$

### V.2.2.2 Semi-conducteur de type p

Dans ce cas d'une faible excitation :

$$p_0 \gg n_i \gg n_0 \text{ et } p = p_0 + \Delta p \approx p_0 \text{ et aussi } n = n_0 + \Delta n \ll p_0$$

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

$$r = \frac{1}{\tau_m} \left( \frac{pn - n_i^2}{p} \right) = \frac{n - n_i^2/p}{\tau_m} = \frac{n - n_0}{\tau_m} \quad r = \frac{\Delta n}{\tau_m} \quad (\text{V.68})$$

On obtient alors une expression du taux de recombinaison des porteurs minoritaires semblable à l'expression (V.56.b), associée aux recombinaisons directes électron-trou.

En raison même de leur définition les taux de recombinaison sont additifs de sorte que le taux de recombinaison résultant de la présence des deux processus s'écrit :

$$r = \frac{\Delta p}{\tau} \quad (\text{V.69})$$

avec  $\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_d} + \frac{1}{\tau_m}$  ou  $\tau_d = \frac{1}{kn_0}$  et  $\tau_d = \frac{1}{CN_R}$

Nous avons considéré le cas d'un seul centre de recombinaison. Dans la pratique il existe effectivement dans chaque type de semiconducteur un centre prédominant, mais si plusieurs centres de recombinaison existent avec des densités et des coefficients de capture comparables, la durée de vie des porteurs minoritaires s'écrit :

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_d} + \sum_i \frac{1}{\tau_{mi}} \quad \text{avec } \tau_{mi} = \frac{1}{C_i N_R} \quad (\text{V.70})$$

### V.2.2.3 Zone de déplétion (dépeuplée)

Dans la zone dépeuplée les densités n et p sont négligeables devant  $n_i, n, p \ll n_i^2$

$$p + n \ll 2n_i$$

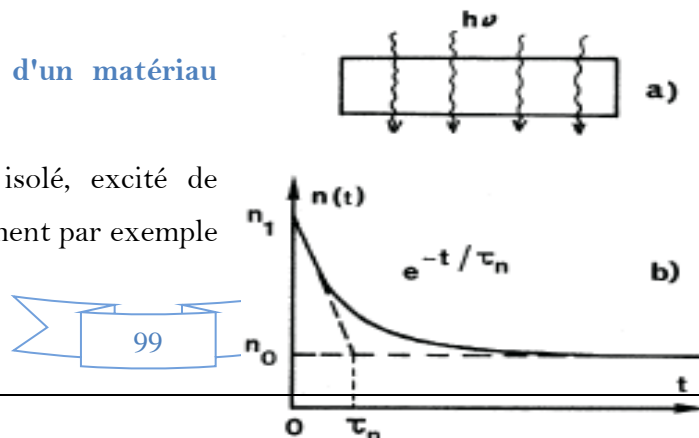
Le taux de recombinaison donné par la relation précédente devient :

$$r = \frac{n_i}{2\tau_m} \quad (\text{V.71})$$

Le signe (-) indique que le nombre de porteurs créés thermiquement est plus important que le nombre de porteurs qui se recombinent. Un taux de recombinaison négatif correspond à une génération thermique de porteurs

### V.2.2.4 Retour à l'équilibre d'un matériau excité

Considérons un semiconducteur isolé, excité de manière homogène, par un éclairage par exemple



(Figure V.4). Les variations des densités de porteurs par unité de temps sont simplement données par la différence entre les taux de génération et les taux de recombinaison

$$\frac{dn}{dt} = g_n - r_n \quad \frac{dp}{dt} = g_p - r_p$$

Considérons le cas d'un semiconducteur de type p en régime de faible excitation,

$$n = n_0 + \Delta n \approx \Delta n, p = p_0 + \Delta p \approx p_0 \quad \text{Figure V.4 Éclairement d'un semiconducteur}$$

L'évolution de la densité d'électrons est régie par l'équation

$$\frac{dn}{dt} = g_n - \frac{n - n_0}{\tau_n} \quad \text{ou} \quad \frac{d\Delta n}{dt} = g_n - \frac{\Delta n}{\tau_n} \quad (\text{V.72})$$

En régime stationnaire, c'est-à-dire sous éclairage permanent,  $\frac{d\Delta n}{dt} = 0$ ,  $\Delta n = \Delta n_0 = Cte$ , l'équation précédente donne :

$$\Delta n_0 = g_n \tau_n$$

L'excédent d'électrons par rapport à l'équilibre est donné par le produit du taux de génération par la durée de vie des porteurs.

En régime transitoire, résultant de la suppression de l'excitation,  $g_n=0$  et l'équation (V.70) s'écrit :

$$\frac{d\Delta n}{dt} = -\frac{\Delta n}{\tau_n} \quad (\text{V.73})$$

En intégrant avec la condition initiale  $\Delta n = \Delta n_0$  à  $t = 0$ , la solution s'écrit :

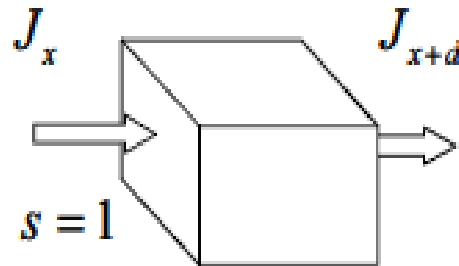
$$\Delta n = \Delta n_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau_n}\right) \quad (\text{V.74})$$

L'excédent d'électrons décroît exponentiellement avec une constante de temps  $\tau_n$  (Fig. V.4.b).

### V.3. Équations d'évolution

#### V.3.1 Équations de continuité

Les équations de continuité régissent la condition d'équilibre dynamique des porteurs dans le semiconducteur. Dans un barreau semiconducteur excité et parcouru par un courant dans la direction  $ox$ , considérons un élément de volume de section unitaire  $s=1$  dans le plan perpendiculaire à  $ox$ , et d'épaisseur  $dx$  (Fig.V.5).



*Figure V.5: Équation de continuité*

La variation du nombre de porteurs par unité de temps dans cet élément de volume est la somme algébrique des nombres de porteurs qui entrent,  $j_x/q$ , qui sortent,  $j_{x+dx}/q$ , qui se créent,  $gsdx = gdx$  et qui se recombinent,  $rdx$ . En ramenant à l'unité de volume, l'expression s'écrit pour les électrons :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{dx} \left[ \left( -\frac{1}{e} j_x \right) - \left( -\frac{1}{e} \left( j_x + \frac{dj_x}{dx} dx \right) \right) \right] + g_n - r_n \quad (\text{V.75})$$

Soit, pour les électrons et les trous :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = +\frac{1}{e} \frac{\partial j_{nx}}{\partial x} dx + g_n - r_n \quad (\text{V.76.a})$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \frac{\partial j_{px}}{\partial x} dx + g_p - r_p \quad (\text{V.76.b})$$

Ou, à trois dimensions :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = +\frac{1}{e} \text{div } J_n + g_n - r_n \quad (\text{V.77.a})$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \text{div } J_p + g_p - r_p \quad (\text{V.77.b})$$

Dans un matériau dopé en régime de faible injection, on pourra écrire les taux de recombinaison sous la forme (V.79), si d'autre part, on explicite les courants à partir des expressions du courant total les équations s'écrivent, à une dimension :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = +n \mu_n \frac{\partial E}{\partial x} + \mu_n E \frac{\partial n}{\partial x} + D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + g_n - \frac{n - n_0}{\tau_n} \quad (\text{V.78.a})$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -p \mu_p \frac{\partial E}{\partial x} + \mu_p E \frac{\partial p}{\partial x} + D_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + g_p - \frac{p - p_0}{\tau_p} \quad (\text{V.78.b})$$

### V.3.2 Longueur de diffusion

Considérons un barreau semiconducteur de type p, excité en surface par un rayonnement peu pénétrant qui crée à la surface un excès  $\Delta n_1$  de paires électron-trou (Fig. V.6).

Les électrons diffusent à l'intérieur du barreau et créent un courant de diffusion donné par :

$$j_{nx} = e D_n \frac{\partial n}{\partial x} \quad (\text{V.79})$$

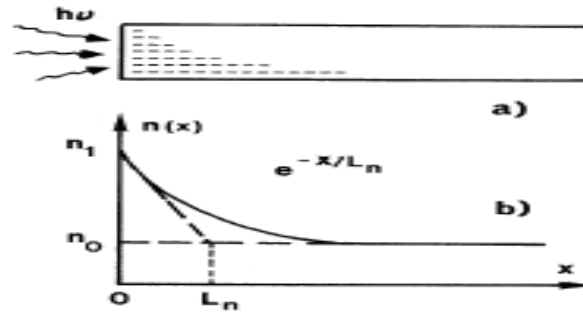


Figure V.6 Éclairement d'un semiconducteur

L'évolution de la densité d'électrons en un point quelconque du barreau est donnée par l'équation (V.76) qui s'écrit en explicitant  $j_{nx}$ .

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + g - \frac{n - n_0}{\tau_n} \quad (\text{V.80})$$

Dans la mesure où le rayonnement est peu pénétrant  $g_n = 0$  dans le volume du semiconducteur. Si en outre l'éclairement est permanent, le régime est stationnaire et  $\partial n / \partial t = 0$ .

L'équation (V.80) s'écrit :

$$\frac{d^2(\Delta n)}{dx^2} - \frac{(\Delta n)}{L_n^2} = 0 \quad (\text{V.81})$$

avec  $L_n^2 = D_n \tau_n$

L'intégration de l'équation (V.81) avec les conditions aux limites  $\Delta n(x = 0) = \Delta n_0$  et  $\Delta n(x \rightarrow \infty) = 0$ , donne :

$$\Delta n = \Delta n_0 \exp\left(\frac{-x}{L_n}\right) \quad (\text{V.82})$$

La densité de porteurs en excès décroît exponentiellement avec une constante de temps  $L_n$  (Fig. V.6.b).  $L_n$  : est appelé longueur de diffusion des électrons dans le matériau de type p.

On définit la même grandeur pour les trous dans un matériau de type n.

$$L_n = \sqrt{D_n \tau_n} \quad L_p = \sqrt{D_p \tau_p}$$

**Chapitre VI. : Jonction PN**

Les dispositifs à semi-conducteurs fonctionnent sur la base du principe selon lequel les propriétés électriques et optiques des semi-conducteurs peuvent être facilement modifiées. Une façon pour aboutir à cela fait par l'utilisation de jonctions entre des matériaux différents. Des jonctions peuvent se former entre matériaux de type n et de type p, entre des matériaux avec des bandes interdites différentes et entre des métaux et semi-conducteurs. Dans ce chapitre, nous étudierons la jonction p-n, qui résulte de la mise en contact et d'un semiconducteur de type n et d'un semiconducteur de type p.

### VI.1 Jonction P-N abrupte à l'équilibre thermodynamique

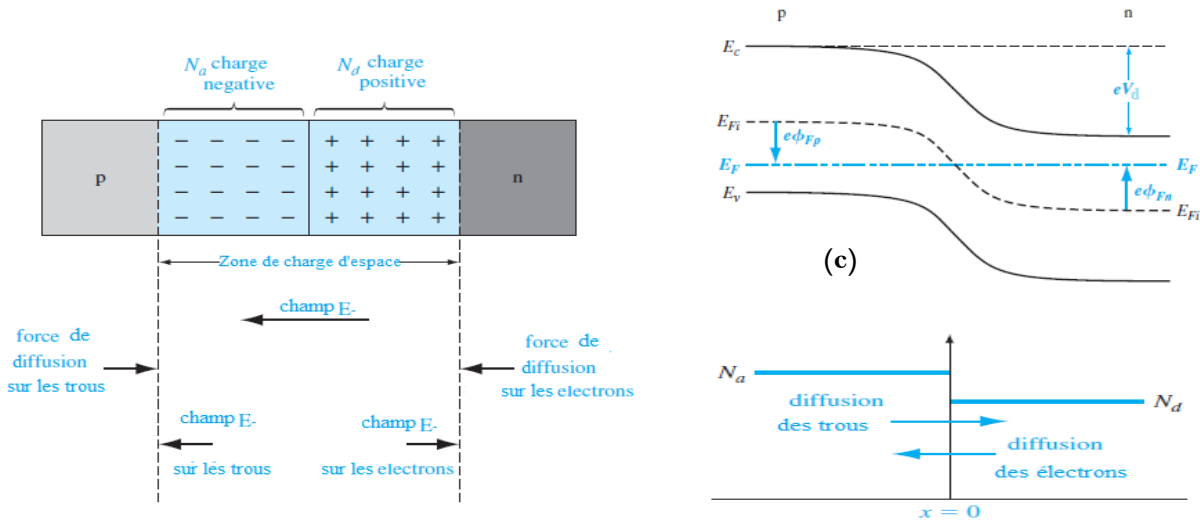
La jonction p-n est l'une des jonctions les plus importantes de l'électronique à semi-conducteurs. La jonction est utilisée comme dispositif dans des applications telles que les redresseurs, les formateurs de formes d'ondes, les condensateurs variables, le laser, les détecteurs, etc. Le transistor bipolaire, qui est l'un des dispositifs électroniques les plus importants utilisent des jonctions p-n.

Pour comprendre comment fonctionne une jonction p-n, nous avons besoin de savoir :

- i) Quelles sont les distributions de porteurs pour les électrons et les trous dans le matériau ?
- ii) Quels sont les processus physiques responsables du flux de courant dans la structure ?

Examinons maintenant ce qui se passe lorsque les matériaux de type p et n sont joints pour former une jonction. En l'absence de toute polarisation appliquée, il n'y a pas de courant net dans le système et le niveau de Fermi est uniforme dans toute la structure.





**Figure VI.1:** (a) Formation d'une jonction p-n à l'équilibre thermodynamique (b) profil de dopage d'une jonction pn uniformément dopée idéale (c) Diagramme de bande d'énergie d'une jonction pn à l'équilibre thermodynamique

Dans la figure VI.1 (a), nous montrons un schéma d'une jonction p-n.

La majorité des porteurs de charges près de l'interface des deux côtés diffusent à travers la jonction (trous du côté p et électrons du côté n), en raison de la différence de densité d'électrons et de trous à travers la jonction.

La plupart des électrons qui diffusent vers le côté p se recombinent avec des trous, et la plupart des trous qui diffusent vers le côté n se recombinent avec des électrons. En conséquence, une région est formée près de la jonction qui a été épuisée des porteurs mobiles. Un champ électrique existe dans cette région qui agit sur les électrons et les trous qui pénètrent dans la région.

Trois régions peuvent être identifiées :

- i) La région de type p où le matériau est électriquement neutre et les bandes d'énergie sont plates. La densité des accepteurs équilibre exactement la densité des trous (en supposant que tous les accepteurs sont ionisés);
- ii) La région de type n éloignée de la jonction où à nouveau le matériau est électriquement neutre et où la densité de donneurs équilibre exactement la densité d'électrons libres. Encore une fois, nous supposons que tous des donneurs sont ionisés.

En général, le porteur majoritaire (trous dans la région p et électrons dans la région n) les densités sont égales à la densité des dopants ionisés tant que le porteur minoritaire les densités sont négligeables.

iii) Autour de la jonction, il y a une région d'appauvrissement où les bandes d'énergie sont courbées et un champ existe qui agit sur les porteurs mobiles, laissant derrière eux des accepteurs chargés négativement dans la région p et les donneurs chargés positivement dans la région n. La région d'appauvrissement s'étend sur une distance  $W_p$  dans la région p et une distance  $W_n$  dans la région n.

Le rapport de  $\mu_p$  et  $D_p$  est donné par la relation d'Einstein :

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{D_p}{\mu_p} = \frac{k_B T}{e} \quad (\text{VI.1})$$

### VI.1.1. Charge d'espace

Nous supposons que dans chacune des régions la conductivité est de nature extrinsèque, c'est-à-dire que les conditions sont remplies dans chacune des régions.

$$(N_d - N_a)_n \gg n_i \text{ et } (N_d - N_a)_p \gg n_i \quad (\text{VI.2})$$

En outre, dans le but de simplifier l'écriture, nous appellerons  $N_d$  l'excédent de donneurs dans la région de type n,  $N_d = (N_d - N_a)_n$  et  $N_a$  l'excédent d'accepteurs dans la région de type p,  $N_a = (N_a - N_d)_p$

Les densités de porteurs libres dans chacune des régions sont alors données par :

$$n_n = N_d \quad p_n = n_i^2 / N_d \quad (\text{VI.3})$$

$$n_p = n_i^2 / N_a \quad p_p = N_a \quad (\text{VI.4})$$

En supposant tous les donneurs et accepteurs ionisés, la charge d'espace dans chacune des régions de la jonction s'écrit :

$$\rho(x) = e [N_d - N_a + p(x) - n(x)] \quad (\text{VI.5})$$

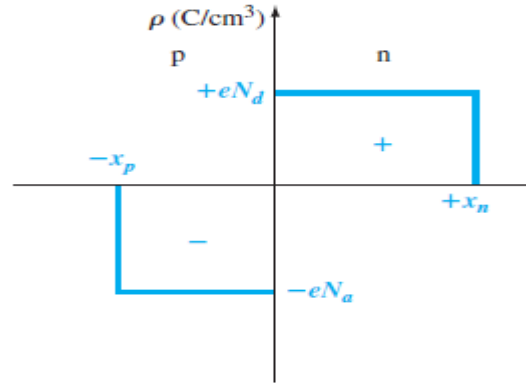
En raison de la présence du champ électrique, la diffusion-recombinaison des porteurs est limitée au voisinage de la jonction métallurgique<sup>1</sup>. Loin de la jonction, les densités de porteurs libres sont données par les expressions (VI.5) et le semiconducteur est neutre,  $\rho(x) = 0$ .

La charge d'espace est représentée sur la figure (IV.2) : côté n la charge est positive car elle résulte de la présence des donneurs ionisés  $N_d$ ; côté p la charge résulte de la présence des accepteurs ionisés  $N_a$ , elle est négative.

Il faut noter que, la charge d'espace résultant de recombinaisons de paires électron-trou, les quantités totales de charges développées dans chacune des régions sont égales.

En raison de la présence, dans la zone de charge d'espace, d'un champ électrique intense, la densité de porteurs libres dans cette région est négligeable.

En outre les frontières entre la zone dépeuplée et les zones neutres de la jonction sont très abruptes.



**Figure VI.3** La densité de charge d'espace dans une jonction pn abrupte.

<sup>1</sup>Jonction métallurgique. Des contacts métalliques sont déposés sur le semiconducteur pour constituer l'anode (contact avec la région p) et la cathode (contact avec la région n)

Il suffit, pour obtenir le potentiel et le champ électriques, d'intégrer l'équation de Poisson avec la densité de charge.

Nous modéliserons la charge d'espace réelle par là En d'autres termes, nous supposons que la zone de charge d'espace est entièrement dépeuplée de porteurs libres et limitée par des frontières abruptes d'abscisses  $x_n$  et  $x_p$ .

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = \frac{-\rho(x)}{\epsilon_s} = -\frac{dE(x)}{dx} \quad (\text{VI.6})$$

où  $\phi(x)$  est le potentiel électrique,  $E(x)$  est le champ électrique,  $\rho(x)$  est la charge volumique densité, et  $s$  est la permittivité du semi-conducteur.

La densité de charge s'écrit dans cette hypothèse :

$$\rho(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } -\infty < x \leq -x_p \\ -qN_a & \text{si } -x_p < x \leq 0 \\ +qN_d & \text{si } 0 \leq x < +x_n \\ 0 & \text{si } +x_p \leq x < +\infty \end{cases} \quad (\text{VI.7})$$

### VI.1.2 Potentiel et champ électriques dans la zone de charge d'espace

Le champ électrique dans la région p est trouvé en intégrant l'équation (VI.6). Nous avons :

( $-\infty < x < x_p$ ) avec  $\rho(x) = 0$ , le champ électrique E est nul ( $E = 0$ )

( $+x_n \leq x \leq +\infty$ ), le champ E est également nul, ( $E = 0$ ) le potentiel est donc constant

Alors :  $V = V_N(x = x_n)$

Le champ électrique au point  $x = x_p$  est nul, alors par intégration de l'équation de Poisson le champ électrique dans la région dopée P de la jonction s'écrit :

$$E_p(x) = -\frac{qN_a}{\epsilon_s}(x - x_p) \quad (\text{VI.8})$$

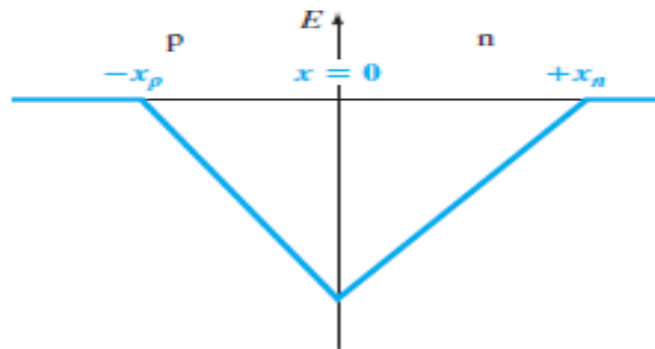
$$0 \leq x < +x_n \text{ avec : } \rho(x) = +qN_d \quad (\text{VI.9})$$

Le champ électrique au point  $x = x_n$  est nul, alors par intégration de l'équation de Poisson le champ électrique dans la région dopée N de la jonction s'écrit :

$$E_n(x) = -\frac{qN_d}{\epsilon_s}(x_n - x) \quad (\text{VI.10})$$

Au point  $x = 0$ , la continuité du champ électrique impose que :

$$\frac{qN_a}{\epsilon_s} x_p = \frac{qN_d}{\epsilon_s} x_n \Rightarrow N_a x_p = N_d x_n \quad (\text{VI.11})$$



**Figure V.4 : Champ électrique dans les différentes régions de la jonction**

Le potentiel électrique créé dans chaque région de la jonction est déterminé par intégration du champ électrique E.

$$E(x) = -\frac{d\phi}{dx} = -\frac{dV}{dx} \Rightarrow V = -\int E(x)dx \quad (\text{VI.12})$$

( $-\infty < x < x_p$ ), le champ électrique E est nul ( $E = 0$ ) .le potentiel est donc constant

Alors  $V = V_p(x = x_p), (x_p < x \leq 0)$  : En  $x = x_p$  ( $E = 0$  et  $V = V_p$ )

Le champ électrique E est donné par la relation précédente :

$$E_p(x) = -\frac{qN_a}{\epsilon_s}(x - x_n)$$

$$E(x) = -\frac{dV}{dx} \Rightarrow \int_{V_p}^{V(x)} dV = -\int_{x_p}^x E(x)dx$$

$$V(x) = \frac{qN_a}{\epsilon_s} \int_{x_p}^x (x - x_p) dx = \frac{qN_a}{2\epsilon_s} (x - x_p)^2 + V_p$$

$$V_p(x) = \frac{qN_a}{2\epsilon_s} (x - x_p)^2 + V_p$$

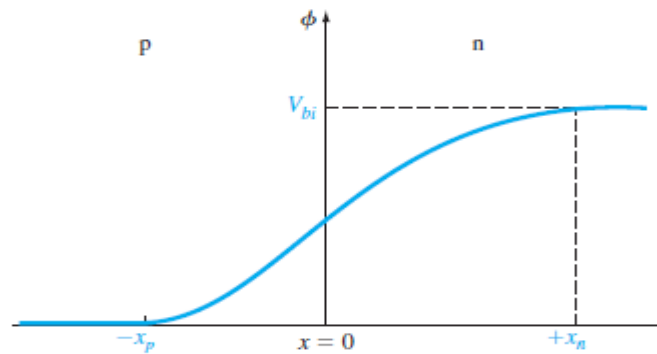
$0 \leq x < +x_n$  : En  $x = x_n$  ( $E = 0$  et  $V = V_n$ )

$$E_n(x) = -\frac{qN_d}{\epsilon_s} (x_n - x)$$

$$E(x) = -\frac{dV}{dx} \Rightarrow \int_{V(x)}^{V_n} dV = -\int_x^{x_n} E(x) dx$$

$$V(x) = +\frac{qN_d}{\epsilon_s} \int_x^{x_n} (x_n - x) dx = -\frac{qN_d}{2\epsilon_s} (x - x_n)^2 + V_n$$

$$V_n(x) = -\frac{qN_d}{2\epsilon_s} (x - x_n)^2 + V_n$$



**Figure VI.5 : Potentiel électrique dans les différentes régions de la jonction**

### VI.1.3. Tension de diffusion

La présence d'une charge d'espace entraîne l'existence d'un champ électrique et d'une variation de potentiel. Le potentiel varie d'une valeur  $V_p$  dans la région neutre de type p, à une valeur  $V_n$  dans la région neutre de type n

La différence de potentiel entre ces deux régions constitue une barrière de potentiel que l'on appelle tension de diffusion, en raison du fait que c'est la barrière qui équilibre les forces de diffusion.

$$V_d = V_n - V_p$$

On peut calculer la tension  $V_d$  de deux manières en écrivant simplement que la structure est en équilibre thermodynamique. La première consiste à écrire que le niveau de Fermi est horizontal dans toute la structure, la seconde consiste à écrire que les transferts d'énergie sont nuls, c'est-à-dire que les courants d'électrons et de trous sont nuls.

Écrivons que le niveau de Fermi est le même dans toute la structure. Les densités d'électron dans chacune des régions s'écrivent

$$n_n = N_c \exp\left(\frac{-(E_{cn} - E_F)}{k_B T}\right) \quad (\text{VI.15.a})$$

$$n_p = N_c \exp\left(\frac{-(E_{cp} - E_F)}{k_B T}\right) \quad (\text{VI.15.b})$$

ce qui permet d'écrire

$$E_{cp} - E_{cn} = k_B T \ln \frac{N_a N_d}{n_i^2} \quad (\text{VI.16})$$

La différence d'énergie  $E_{cp} - E_{cn}$  n'est autre que la différence d'énergie potentielle des électrons de conduction entre la région de type p et la région de type n. En effet, les électrons et les trous participant à la conduction étant situés aux extrémités des bandes, leur énergie cinétique est nulle puisque la vitesse de groupe est nulle (extremum de la fonction énergie) et toute leur énergie est potentielle.

$$V_d = V_n - V_p = (E_{cp} - E_{cn})/e$$

La tension de diffusion est par conséquent donnée par l'expression

$$V_d = k_B T \ln \frac{N_a N_d}{n_i^2} \quad (\text{VI.18})$$

#### VI.1.4. Largeur de la zone de charge d'espace

La continuité en  $x = 0$ , de la composante normale du vecteur déplacement  $D = \epsilon E$ , permet d'établir une relation entre  $x_n$  et  $x_p$  Ecrivons :  $\epsilon E_{0-} = \epsilon E_{0+}$ .

$$eN_a x_n = -eN_d x_p$$

En posant  $W_p = |x_p| = -x_n$  et  $W_n = |x_n| = -x_p$ , la relation s'écrit : (VI.19)

$$N_d W_n = N_a W_p \quad (\text{VI.20})$$

Cette relation traduit simplement le fait que les surfaces sur la figure (IV.3) sont égales, c'est-à-dire que le total des charges négatives développées dans la région de type p est égal au total des charges positives développées dans la région de type n. L'expression (VI.20) montre ainsi que la charge d'espace s'étend principalement dans la région là moins dopée. Cette propriété sera mise à profit en particulier dans les transistors à effet de champ.

On obtient l'expression de la largeur de la zone de charge d'espace en écrivant la continuité du potentiel en  $x = 0$ .

$$\frac{eN_a}{2\epsilon} x_p^2 + V_p = \frac{eN_d}{2\epsilon} x_n^2 + V_n \quad (\text{VI.21})$$

$$(\text{VI.22})$$

$$V_d = V_n - V_p = \frac{e}{2\varepsilon} (N_d W_n^2 = N_a W_p^2)$$

En utilisant la relation (VI .20), cette expression s'écrit sous l'une ou l'autre des formes suivantes

$$V_d = \frac{eN_a}{2\varepsilon} W_p^2 \left(1 + \frac{N_a}{N_d}\right) = \frac{eN_d}{2\varepsilon} W_n^2 \left(1 + \frac{N_d}{N_a}\right) \quad (\text{VI .23})$$

Ce qui donne pour  $W_n$  et  $W_p$  les expressions

$$W_n^2 = \frac{2\varepsilon}{eN_d} \frac{1}{1 + N_d/N_a} V_d \quad (\text{VI .24.a})$$

$$W_p^2 = \frac{2\varepsilon}{eN_a} \frac{1}{1 + N_a/N_d} V_d \quad (\text{VI .24.b})$$

En explicitant la tension de diffusion à partir de l'expression (VI .23) on obtient

$$W_n^2 = 2L_{Dn} \left( \frac{1}{1 + N_d/N_a} \ln \frac{N_a N_a}{n_i^2} \right)^{1/2} \quad (\text{VI .25.a})$$

$$W_p^2 = 2L_{Dp} \left( \frac{1}{1 + N_a/N_d} \ln \frac{N_a N_d}{n_i^2} \right)^{1/2} \quad (\text{VI .25.a})$$

Avec :  $L_{Dn} = \left( \frac{\varepsilon k_B T}{2e^2 N_d} \right)^{1/2}$        $L_{Dp} = \left( \frac{\varepsilon k_B T}{2e^2 N_a} \right)^{1/2}$

$L_{Dn}, L_{Dp}$ : sont les longueurs de Debye dans les régions de type n et de type p.

La largeur de la zone de charge d'espace est  $W = W_n + W_p$ . Si la jonction est très dissymétrique, avec par exemple  $N_a \gg N_d$ , la zone de charge d'espace se développe essentiellement dans la région la moins dopée, sa largeur est donnée par :

$$W = W_n \approx 2L_{Dp} \left( \ln \frac{N_a N_d}{n_i^2} \right)^{1/2} \quad (\text{VI .26})$$

## VI.2 Jonction abrupte polarisée

Lorsque l'on polarise la jonction, on modifie la barrière de potentiel et par suite la diffusion des porteurs d'une région vers l'autre.

Lorsque la tension de polarisation  $V$  est positive, la différence de potentiel entre les régions n et p au niveau de la jonction, devient  $V_n - V_p = V_d - V$  (Figure IV.6.b) et la hauteur de la barrière de potentiel devient  $(V_d - V)$  (Figure IV.6.c). Il suffit d'observer le décalage des niveaux de Fermi dans les régions neutres pour expliquer cette modification.

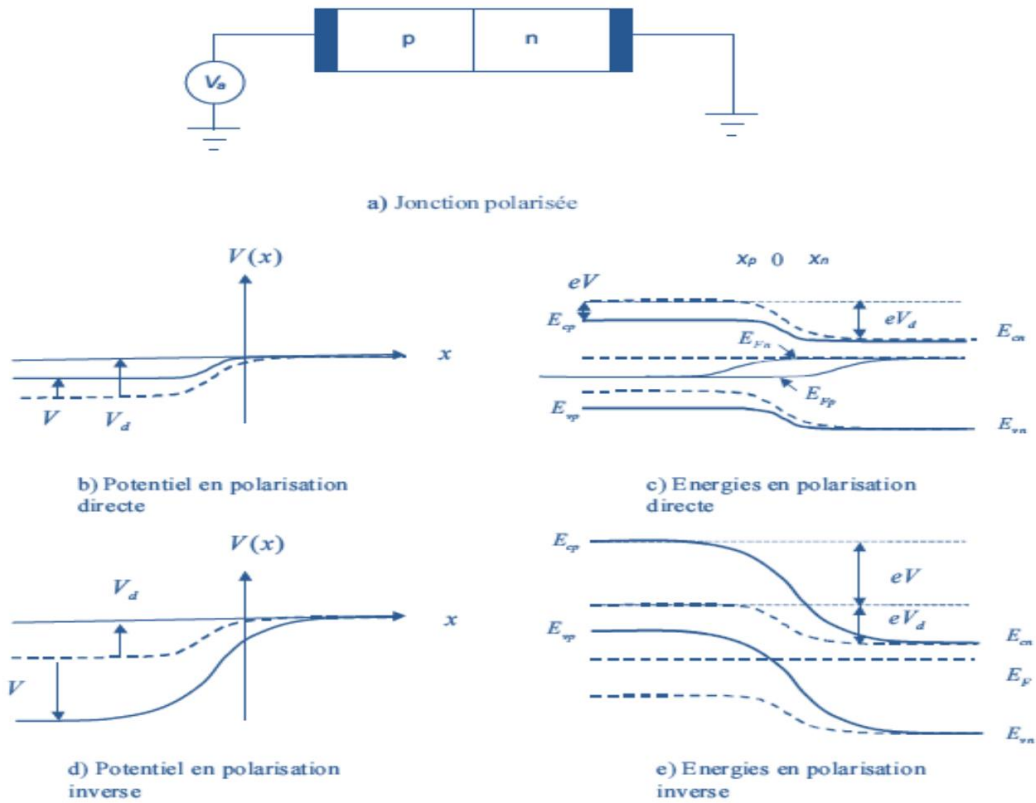


Figure VI.6 : Jonction pn polarisée

Il suffit d'observer le décalage des niveaux de Fermi dans les régions neutres pour expliquer cette modification. La différence des niveaux de Fermi dans les régions neutres est la différence de potentiel appliquée. Bande de valence et bande de conduction se positionnent dans les régions neutres par rapport au niveau de Fermi en fonction du dopage.

La barrière de potentiel n'est plus suffisante pour arrêter la diffusion des porteurs, les électrons diffusent de la région n vers la région p, et les trous de la région p vers la région n. La diode est polarisée dans le sens direct, le courant direct circule de la région p vers la région n.

Lorsque la tension de polarisation  $V$  est négative, la différence de potentiel aux bornes de la zone de charge d'espace est augmentée,  $V_n - V_p = V_d + V$  (Figure IV.6.d), et la hauteur de la barrière de potentiel devient  $e(V_d + V)$  ((Figure IV.6.e).

L'équilibre entre le courant de conduction et le courant de diffusion est rompu mais cette fois au profit du courant de conduction. La diffusion des porteurs majoritaires est bloquée, seuls les porteurs minoritaires qui atteignent la zone de charge d'espace passent dans la région



opposée, propulsés par le champ électrique. La diode est polarisée dans le sens inverse, le courant inverse circule de la région n vers la région p. En raison des différences de densités entre les porteurs majoritaires et les porteurs minoritaires, le courant inverse est considérablement plus faible que le courant direct

### VI.2.1 Distribution des porteurs

Dans un premier temps, on se place en régime de faible injection, c'est-à-dire la densité des porteurs majoritaires n'est pas affectée par la polarisation, il nous reste à évaluer la densité des porteurs minoritaires.

#### a. Densités de porteurs aux limites de la zone de charge d'espace

Lorsque la jonction est polarisée, le champ électrique à l'intérieur de la zone de charge d'espace est modifié, les courants d'électrons et de trous s'écrivent en notant le champ  $E'$  pour ne pas confondre avec l'énergie

$$j_n = \mu_n \left( neE' + kT \frac{dn}{dx} \right) \quad (\text{VI.27.a})$$

$$j_p = \mu_p \left( peE' + kT \frac{dp}{dx} \right) \quad (\text{VI.27.b})$$

En régime de faible injection, on peut montrer que les courants  $j_n$  et  $j_p$  sont beaucoup plus faibles que chacune de leurs composantes.

**Exemple :** Calculons par exemple l'ordre de grandeur du courant de diffusion de trous. Au niveau de la zone de charge d'espace d'épaisseur  $W$  on peut écrire le gradient de concentration des trous sous la forme approchée

$$j_{pd} = kT\mu_p \frac{dp}{dx} \approx kT\mu_p \frac{Pp}{W} = \frac{kT}{e} \frac{\sigma_p}{W} \quad (\text{VI.28})$$

$$\frac{dp}{dx} \approx \frac{\Delta p}{\Delta x} = \frac{Pp - Pn}{W} \approx \frac{Pp}{W} \quad (\text{VI.29})$$

où  $\sigma_p$  est la conductivité de la région de type p de la jonction. Pour une jonction réalisée avec une région de type p telle que  $\sigma_p = 100 \Omega^{-1}cm^{-1}$  et  $W = 1\mu m$ , on obtient

$j_{pd} = 10^4 Acm^{-2}$ , soit un courant de 1 A pour une jonction de  $10^4 \mu m^2$  de section. Ce courant est considérablement plus grand que le courant direct d'une diode de  $10^4 \mu m^2$  de section, qui est de l'ordre de quelques dizaines de mA.

On peut donc négliger les courants  $j_n$  et  $j_p$  devant chacune de leurs composantes, les équations (VI .27) s'écrivent alors

$$neE' + kT \frac{dn}{dx} = 0 \quad (\text{VI .28.a})$$

$$peE' + kT \frac{dp}{dx} = 0 \quad (\text{VI .28.b})$$

Comme à l'équilibre thermodynamique, ces équations s'écrivent

$$\frac{dn}{n} = -\frac{e}{kT} E' dx = \frac{e}{kT} dV \quad (\text{VI .29.a})$$

$$\frac{dp}{p} = \frac{e}{kT} E' dx = -\frac{e}{kT} dV \quad (\text{VI .29.b})$$

La densité d'électrons en  $x = x_n$  et  $N_d$ , pour calculer la densité d'électrons en  $x = x_p$  on intègre l'équation (VI .29.a) de  $x_n$  à  $x_p$ . De même pour calculer la densité de trous en  $x = x_n$  on intègre de  $x_p$  à  $x_n$ .

Considérons par exemple les électrons

$$\ln \frac{n(x_n)}{n(x_p)} = \frac{e}{kT} (V_n - V_p) \quad (\text{VI .30})$$

En l'absence de polarisation  $V_n - V_p = V_d$ ,  $n(x_n) = n_n$  et  $n(x_p) = n_p$  L'expression (VI .30) s'écrit

$$\ln \frac{n_n}{n_p} = \frac{eV_d}{kT} \quad (\text{VI .31})$$

En présence de polarisation  $V$ ,  $V_n - V_p = V_d$ ,  $n(x_n) = n_n$  et  $n(x_p) = n_p$

L'expression (VI .30) s'écrit

$$\ln \frac{n_n}{n'_p} = \frac{e(V_d - V)}{k_B T} \quad (\text{VI .32})$$

La différence membre à membre entre les expressions (VI .31 et 32) donne

$$\ln \frac{n'_p}{n_p} = \frac{eV_d}{kT} \Rightarrow n'_p \exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right) \quad (\text{VI .33})$$

Avec une expression semblable pour les trous.

Ainsi en régime de faible injection, les densités de porteurs majoritaires ne sont pas affectées, les densités de porteurs minoritaires aux frontières de la zone de charge d'espace sont données par

$$n'(x = x_p) = n'_p = n_p \exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right) = \frac{n_i^2}{N_d} \exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right) \quad (\text{VI .34.a})$$

$$p'(x = x_n) = p'_n = p_n \exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right) = \frac{n_i^2}{N_d} \exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right) \quad (\text{VI .34.b})$$

Le produit  $np$  en chacun des points  $x_n$  et  $x_p$  s'écrit donc

$$n'_p p'_p = n'_n p'_n = n_i^2 \exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right) \quad (\text{VI.35})$$

- En polarisation directe,  $V$  est positif, on obtient  $n'_p > n_p$  et  $p'_n > p_n$ , des électrons sont injectés dans la région de type p et des trous dans la région de type n.
- En polarisation inverse,  $n'_p < n_p$  et  $p'_n < p_n$ . Des électrons sont extraits de la région de type p et des trous de la région de type n.

### b. Distribution des porteurs dans les régions neutres

Les porteurs majoritaires ne sont pas affectés. Les distributions des porteurs minoritaires sont régies par les équations de continuité. Considérons les trous dans la région de type n, l'équation s'écrit

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \frac{\partial j_p(x)}{\partial x} - \frac{p - p_n}{\tau_p} \quad (\text{VI.36})$$

où  $\tau_p$  représente la durée de vie des trous dans la région de type n. Les régions neutres sont dopées et par suite relativement conductrices, de sorte que la tension aux bornes de ces régions est négligeable. Le champ électrique dans ces régions est donc faible alors que parallèlement le gradient de la concentration de porteurs minoritaires y est important en raison du phénomène d'injection. Il en résulte que le courant  $j_p(x)$  est essentiellement un courant de diffusion

$$j_p(x) = -eD_p \frac{\partial p}{\partial x} \quad (\text{VI.37})$$

L'équation (VI.36) s'écrit alors

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \frac{p - p_n}{\tau_p} \quad (\text{VI.38})$$

Si la polarisation de la jonction est constante, le régime est stationnaire de sorte que  $\partial p / \partial t = 0$ , l'équation s'écrit

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \frac{p - p_n}{L_p^2} \quad (\text{VI.39})$$

Où  $L_p = \sqrt{D_p \tau_p}$  est la longueur de diffusion des trous dans la région de type n de la jonction. La solution de l'équation (VI.39) est de la forme générale

$$p - p_n = A e^{-\frac{x}{L_p}} + B e^{\frac{x}{L_p}} \quad (\text{VI.40})$$

Les constantes A et B sont déterminées par les conditions aux limites, d'une part en  $x = x_n$  à la frontière de la zone de charge d'espace, et d'autre part en  $x = x_c$  au contact avec

l'électrode métallique à l'extrémité de la région de type n. En  $x = x_n$  la densité de trous est donnée par l'expression ( VI .34.b).

En  $x = x_c$  en raison de l'importante perturbation créée dans le réseau cristallin par la soudure du contact métallique, la vitesse de recombinaison des porteurs excédentaires est très grande.

En d'autres termes leur durée de vie est très faible, de sorte que la densité de trous en  $x = x_c$  est la densité d'équilibre . En portant ces deux conditions aux limites dans l'expression ( VI .40.), on calcule les constantes A et B. La distribution de trous dans la région de type n, et par suite la distribution d'électrons dans la région de type p, sont données par

$$p - p_n = \frac{p_n}{sh(d_n/l_p)} (\exp(eV/k_B T) - 1) sh(x_c - x)/l_p \quad (\text{VI } 41.a)$$

$$n - n_p = \frac{n_p}{sh(d_p/l_n)} (\exp(eV/k_B T) - 1) sh(x - x'_c)/l_n \quad (\text{VI } 41.b)$$

où  $d_n = x_c - x_n$  et  $d_p = x_p - x'_c$  représentent les longueurs des régions neutres de type n et de type p respectivement. Ces expressions se simplifient dans les cas limites où les longueurs  $d_n$  et  $d_p$  sont beaucoup plus grandes ou beaucoup plus petites que les longueurs de diffusion des porteurs minoritaires correspondants

Pour  $d_n \gg L_p$  et  $d_p \gg L_n$  les expressions (VI 41) se simplifient en développant les fonctions hyperboliques, on obtient

$$p - p_n \approx p_n (\exp(eV/k_B T) - 1) \exp((x_n - x)/L_p) \quad (\text{VI } 42.a)$$

$$n - n_p \approx n_p (\exp(eV/k_B T) - 1) \exp((x - x_p)/L_n) \quad (\text{VI } 42.b)$$

Pour  $d_n \ll L_p$  et  $d_p \ll L_n$  les arguments des sinus hyperboliques sont très petits et on peut écrire  $sh \varepsilon \approx \varepsilon$ . Les expressions (IV .42) s'écrivent alors

$$p - p_n = \frac{p_n}{d_n} (\exp(eV/k_B T) - 1)(x_c - x) \quad (\text{VI } 43.a)$$

$$n - n_p = \frac{n_p}{d_p} (\exp(eV/k_B T) - 1)(x - x'_c) \quad (\text{VI } 43.b)$$

Les distributions des porteurs dans les régions neutres sont représentées sur la figure (IV.7). Dans l'hypothèse des faibles injections que nous avons utilisée, les densités de porteurs majoritaires sont constantes. Les densités de porteurs minoritaires décroissent dans chacune des régions à partir de la zone de charge d'espace, suivant des lois qui sont fonction des rapports  $d_n/l_p$  et  $d_p/l_n$ . Ces rapports peuvent être différents d'une région à l'autre

#### IV.2.2. Courants de porteurs minoritaires

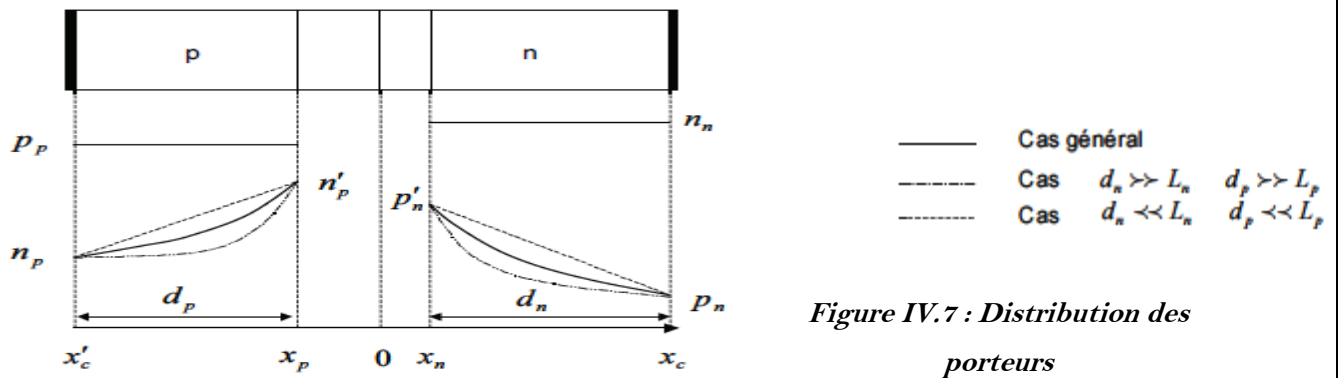
Les courants de trous dans la région de type n et d'électrons dans la région de type p sont des courants de diffusion. Ils sont par conséquent donnés par

$$j_p(x) = -eD_p \frac{dp}{dx} \quad j_n(x) = -eD_n \frac{dn}{dx} \quad (\text{VI.44})$$

En explicitant  $n_p = n_i^2/N_a$  et  $p_n = n_i^2/N_d$ , les expressions (VI.42,43 et 44), on obtient par simple dérivation

- Pour  $d_n/l_p$  et  $d_p/l_n$  quelconques

$$j_p = \frac{e n_i^2 D_p}{N_a l_p \text{sh}(d_n/L_p)} (\exp(eV/k_B T) - 1) \text{ch}((x_c - x)/L_p) \quad (\text{VI.45})$$



- Pour  $d_n \gg l_p$  et  $d_p \gg l_n$

$$j_p = \frac{e n_i^2 D_p}{N_a L_p} (\exp(eV/k_B T) - 1) \exp((x_n - x)/L_p) \quad (\text{VI.46.a})$$

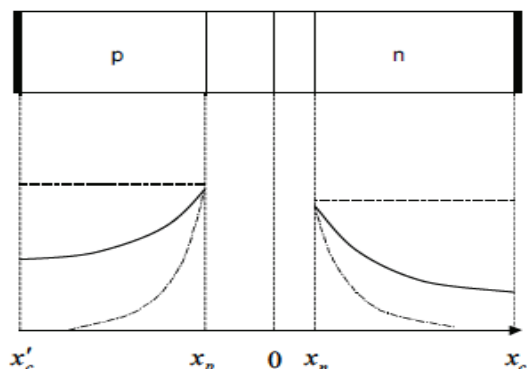
$$j_n = \frac{e n_i^2 D_n}{N_a L_n} (\exp(eV/k_B T) - 1) \exp((x - x_p)/L_n) \quad (\text{VI.46.b})$$

Pour  $d_n \ll l_p$  et  $d_p \ll l_n$

$$j_p = \frac{e n_i^2 D_p}{N_a d_n} (\exp(eV/k_B T) - 1) \quad (\text{VI.47.a})$$

$$j_n = \frac{e n_i^2 D_n}{N_a d_p} (\exp(eV/k_B T) - 1) \quad (\text{VI.47.b})$$

Ces densités de courant sont représentées sur la figure (VI.8). Dans le cas où la longueur d'une région est très inférieure à la longueur de diffusion des porteurs minoritaires



— Cas général  
 - - - Cas  $d_n \gg L_n \quad d_p \gg L_p$   
 ···· Cas  $d_n \ll L_n \quad d_p \ll L_p$

dans cette région, la distribution linéaire des porteurs excédentaires crée un courant de diffusion constant dans toute la région. Dans le cas contraire les courants de porteurs minoritaires ont disparu avant d'atteindre le contact correspondant

*Figure VI.8 : Courants de porteurs minoritaires*

### IV.2.3. Densité de courant - caractéristique

Les densités de courant d'électrons et de trous que nous avons calculées sont relatives à des régions différentes de la jonction. Le courant total traversant la jonction est la somme des courants d'électrons et de trous en un même point. Pour calculer ce courant supposons dans un premier temps que la zone de charge d'espace n'est le siège d'aucun mécanisme de génération-recombinaison. Les courants  $j_n$  et  $j_p$  sont alors constants à la traversée de cette zone et on peut écrire les égalités .

$$j_n(x_p) = j_n(x_n) \quad (\text{VI 48.a})$$

$$j_p(x_n) = j_p(x_p) \quad (\text{VI 48.b})$$

Les expressions établies au paragraphe précédent permettent de calculer  $j_n(x_p)$  d'une part et  $j_n(x_n)$  d'autre part. On peut donc compte tenu des relations (VI 48) connaître les courants d'électrons et de trous en un même point,  $x_n$  ou  $x_p$ . Le courant total qui est conservatif, c'est-à-dire indépendant de  $x$ . Pour prouver rigoureusement cette propriété, il suffit de tenir compte du fait que la divergence du courant total est nul puis de négliger le courant de déplacement

(nul en régime établi). Appliquée à un volume de infinitésimal normal à la section de la jonction cette propriété permet de montrer que le courant de conduction est constant en fonction de  $x$ .

$$(\text{VI 49})$$

$$j = j_n(x_p) + j_p(x_p) = j_n(x_n) + j_p(x_n) = j_n(x_p) + j_p(x_n)$$

En faisant  $x = x_n$  dans les expressions de  $j_p(x)$ , et  $x = x_p$  dans les expressions de  $j_n(x)$ , on obtient

$$J = J_s(\exp(eV/k_B T) - 1) \quad (\text{VI 50})$$

avec

$$J_s = \frac{e n_i^2 D_p}{N_d l_p \text{th}(d_n/L_p)} + \frac{e n_i^2 D_n}{N_a l_n \text{th}(d_p/L_n)} \quad (\text{VI 51})$$

Pour  $d_i \gg l_j$ ,  $\text{th}(d_i/l_j) \approx 1$

$$J_s = \frac{e n_i^2 D_p}{N_d L_p} + \frac{e n_i^2 D_n}{N_a L_n} \quad (\text{VI 52})$$

Pour  $d_i \ll l_j$ ,  $th(d_i/l_j) \approx d_i/l_j$   $J_S = \frac{e n_i^2 D_p}{N_d d_n} + \frac{e n_i^2 D_n}{N_a d_p}$  (VI 53)

La caractéristique de la diode (Eq. IV.50) est représentée sur la figure (VI.7-a).

On notera  $V_a$  la tension appliquée au lieu de  $V$  comme dans les relations précédentes. En polarisation inverse,  $V_a < 0$ , dès que  $-V_a > k_B T/e$ , l'exponentielle négative devient négligeable devant 1 et le courant atteint une valeur constante  $J = -J_S$ .  $J_S$  est appelé courant de saturation de la diode. En polarisation directe,  $V_a > 0$ . Dès que  $V_a > k_B T/e$  l'exponentielle positive devient très supérieure à 1 et le courant s'écrit

$$J = J_S \exp(eV_a/k_B T) \tag{VI 54}$$

Lorsque  $V_a$  devient comparable à  $V_d$  l'hypothèse de faible injection utilisée dans le calcul devient injustifiée car dans l'une ou l'autre des régions la densité de porteurs minoritaires injectés devient comparable à la densité de porteurs majoritaires. On peut montrer que le courant devient alors proportionnel à  $\exp(eV_a/2k_B T)$ . Enfin lorsque  $V_a$  devient supérieur à  $V_d$ , la barrière de potentiel s'annule et le courant n'est limité que par les résistances série des régions neutres, le régime devient ohmique  $J = r_s(V_a - V_d)$ ;

$r_s$  est la résistance série de la diode.

La figure (VI.7.b) représente, pour une diode symétrique ( $N_d = N_a$ ), la variation du potentiel dans toute la diode.

Pour  $V_a < V_d$ , la variation du potentiel est localisée dans la zone de charge d'espace dont la largeur varie comme  $(V_a - V_d)^{1/2}$  (courbe en pointillés), les zones neutres sont quasiment des équipotentielles, le courant est essentiellement de diffusion.

Pour  $V_a > V_d$ , la barrière de potentiel est nulle à la fois en hauteur et en largeur, l'excès de tension  $V_a - V_d$  est absorbé par la résistance série. Le courant est alors de conduction et le régime est ohmique.

Notons que pour une jonction symétrique la variation de tension est plus faible dans la région de type n que dans la région de type p car sa résistivité est plus faible ( $N_d = N_a$ ,  $\mu_n \gg \mu_p$ ).

Enfin dans chacune des régions la variation de tension, linéaire loin de la jonction, n'est pas linéaire au voisinage de celle-ci car l'injection de porteurs minoritaires, assortie de l'augmentation de la densité de porteurs majoritaires assurant la neutralité électrique, augmente la conductivité du matériau sur une longueur de l'ordre de grandeur de la longueur de diffusion de ces porteurs.

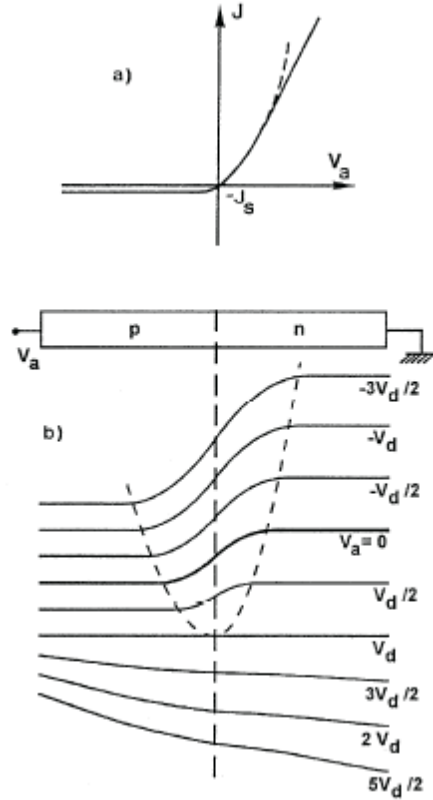


Figure VI.7. a) caractéristique et b) distribution du potentiel

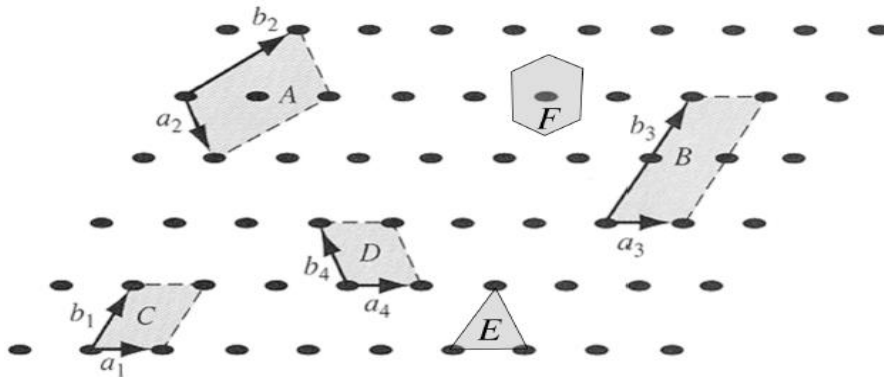
## Applications

### Exercice 01 :

#### I.1 Cellules élémentaires et cellules élémentaires primitives

Un monocristal est représenté en deux dimensions sur la figure 1.

- Citer la ou les cellules unitaires du petit volume A-F du cristal.
- Citer la ou les cellules primitives du petit volume A-F du cristal.



A

I.2 . Déterminez le nombre d'atomes par maille élémentaire dans :

- un réseau cubique à faces centrées.



- b) un réseau cubique centré
- c) un réseau de diamant.

**Exercice 02**

- 1.1. Déterminer la densité volumique de l'atome dans les cristaux avec une constante de réseau  $a = 5\text{Å}$  pour :
- (a) le cubique simple.
  - b) le cubiques centrée.
  - (c) le cubique à faces centrées.
- 1.2. La constante de réseau de *GaAs* est  $5,65\text{Å}$ .
- a) Déterminer le nombre d'atomes de *Ga* et d'atomes *As* par  $\text{cm}^3$ .
  - b) Déterminer la densité volumique des atomes dans un semi- conducteur du germanium.

**Exercice N° 03 :**

Densité d'états par unité de volume sur une zone d'énergie particulière.

- Considérons la densité d'états donnée par l'équation (IV.23). Calculez la densité d'états par unité de volume avec des énergies comprises entre 0 et 1 eV.

**Exercice N° 04:**

Déterminer le nombre d'états quantiques par ( $\text{cm}^3$ ) dans le silicium entre  $E_c + E_c + k_B T$  à  $T = 300\text{K}$

**Exercice N° 05:**

Déterminez l'énergie à laquelle l'approximation de Boltzmann peut être considérée comme valide  
Calculez l'énergie, en termes de  $k_B T$  et  $E_F$ , pour laquelle la différence entre l'approximation de Boltzmann et la fonction de Fermi – Dirac représentent 5% de la fonction de Fermi.

**Exercice N° 06 :**

Déterminer la température à laquelle il y a 1% de probabilité qu'un état énergétique soit vide.  
Supposons que le niveau d'énergie de Fermi pour un matériau particulier est de 6,25 eV et que les électrons de ce matériau régis par la fonction de distribution de Fermi-Dirac  
Calculez la température à laquelle il y a une probabilité de 1% qu'un état à 0,30 eV en dessous du niveau d'énergie de Fermi ne contienne pas d'électron.

**Exercice N° 07 :**

L'Antimoniure d'indium (In Sb) est le matériau qui a la plus petite bande interdite de tous les composants semi conducteurs intrinsèque :  $E_g = 0,18 \text{ eV}$  à température ambiante. Il est utilisé dans les détecteurs infrarouges. En outre, les valeurs de certains paramètres utiles pour l'InSb à température ambiante sont : Concentration intrinsèque  $n_i = 1.6 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ , et le rapport de la masse effective des trous par rapport à celle des électrons est de  $\frac{m_h^*}{m_e^*} = 35$ .

- 1- Déterminer la position du niveau de Fermi dans la bande interdite de l'InSb à température ambiante. On prendra comme référence énergétique, le haut de la bande de valence ( $E_v = 0 \text{ eV}$ ).
- 2- Déterminer le rapport de la densité effective des états dans la bande de conduction  $N_c$  par rapport à celle dans la bande de valence  $N_v$ .

**Exercice N° 08:**

Calculer la densité effective d'états pour les bandes de conduction et de valence de GaAs et Si à  $T = 300K$ .

**Exercice N° 09:**

Trouver le niveau de Fermi dans le Silicium.

Où se situe  $E_F$  dans la bande d'énergie du silicium, à  $T = 300K$  avec  $n = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  et pour  $p = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ?

**Exercice 10 :**

On considère l'arséniure de Galium (GaAs) pour lequel on connaît la hauteur de la bande interdite :  $1.43 \text{ eV}$ , la mobilité des électrons :  $8500 \text{ } 10^3 \text{ cm}^2 / \text{V/s}$ , la mobilité des trous  $400 \text{ } 10^3 \text{ cm}^2 / \text{V/s}$ , la masse effective des électrons  $7 \cdot 10^{-2} m_0$ , la masse effective des trous  $0.5 m_0$ . On supposera que les mobilités ne varient pas en fonction de la densité des impuretés présentes dans le semiconducteur et qu'elles évoluent proportionnellement à  $T^{-3/2}$  :

On donne  $N_0 = \frac{2}{h^3} (2\pi m_0 kT)^{3/2} = 2 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$  ;  $m_0$ : masse de l'électron :  $0.91 \cdot 10^{-30} \text{ kg}$  ,

$q$  : charge élémentaire :  $1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

$T_0$  : température ambiante à  $T = 300 \text{ K}$  ,  $k_B T = 26 \text{ m eV}$  .:

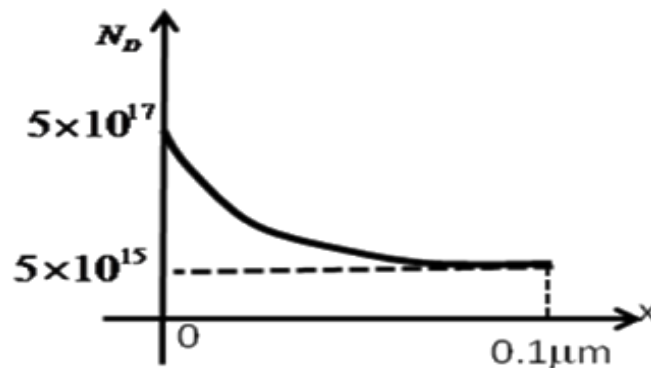
- 1) Donner les expressions de la conductivité et la résistivité d'un semi-conducteur
- 2) Calculer la densité intrinsèque de GaAs à la température ambiante.
- 3) Calculer la résistivité de GaAs à la température ambiante.

A partir de maintenant on dope de GaAs de telle façon que les porteurs négatifs  $10^{20} \text{ m}^{-3}$

- a°) Calculer la densité des porteurs positifs et des porteurs négatifs.
- b°) Calculer la résistivité de GaAs dopé.

**Exercice 11 :**

Considérons un échantillon de silicium de type n de longueur  $0.1 \mu\text{m}$  dans lequel le dopage varie de façon exponentielle de  $5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  à  $5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ .



- 1- Rappeler la relation d'Einstein.
  - 2- Donner l'expression du courant des porteurs majoritaires
  - 3- En déduire l'expression du champ électrique à l'équilibre.
  - 4- En considère que la densité des dopages suit la relation suivante :  $N_D(x) = N_D(0) e^{-x/\lambda}$
- Calculer la valeur de  $\lambda$  et puis celle du champ électrique à l'équilibre

**Exercice 12 :**

Considérons une jonction P-N abrupte de silicium avec une polarisation nulle à  $T = 300K$  avec des concentrations de dopage de  $N_A = 5 \cdot 10^{16} cm^{-3}$  et  $N_D = 5 \cdot 10^{15} cm^{-3}$ , de section circulaire de diamètre 0,05 cm.

On donne :  $V_T = 259 mV$  à  $T = 300K$ ,  $\epsilon_r = 11.7$   $\epsilon = 8.85 \cdot 10^{-14} F/cm$

1. Calculer la tension de diffusion de la jonction, en supposant que la concentration en électrons libres dans le silicium intrinsèque est  $n_i = 1.5 \cdot 10^{10} cm^{-3}$ .
2. Calculer la largeur de la zone de transition  $W$ .
3. En déduire les épaisseurs de la jonction  $x_n, x_p$ .
4. Calculez le champ maximal  $E_{max}$ .
5. Trouvez la valeur de la charge stockée de part et d'autre de la jonction  $Q$ .
6. Calculez la capacité de jonction  $C_j$ .

Solutions des exercices

Solution d'exercice N° 01 :

I.1) Cellule primitive et élémentaire

1) Les cellules unitaires sont A, B, C, D et F.

2) Les cellules primitives sont C, D et F.

I.2 a) cellule unitaire cubique à faces centrées (cfc)

Une sphère de la cellule unitaire cfc partage le volume avec 8 cellules unitaires. Par conséquent, le nombre de sphères au coin est  $1/8$ .

Il y a 8 faces dans la cellule unitaire cfc. Une sphère au visage partage avec 2 cellules unitaires, c'est-à-dire que le nombre est  $1/2$ .

Il y a 6 faces dans la cellule unitaire cfc. Le nombre total de sphères vaut alors

$$1/8 \times 8 + 1/2 \times 6 = 4.$$

b) cube centré sur le corps (cc)  $1/8 \times 8 + 1 = 2$

c) diamant  $1/8 \times 8 + 1/2 \times 6 + 4 = 8$

La cellule unitaire diamant se compose de 4 cellules unitaires cci. Par conséquent, le nombre d'atomes est de 4 fois la valeur cc.

Solution d'exercice N° 02 :

1.1. Densité =  $N/V$ , où  $N$  est le nombre d'atomes dans la maille élémentaire et  $V$  est le volume de l'unité cellule.

$$a) \frac{1}{a^3} = \frac{1}{(5 \times 10^{-8})^3} = 8 \times 10^{21} (\text{atomes/cm}^3)$$

$$b) \frac{2}{a^3} = \frac{2}{(5 \times 10^{-8})^3} = 1.6 \times 10^{22} (\text{atomes/cm}^3)$$

$$c) \frac{4}{a^3} = \frac{4}{(5 \times 10^{-8})^3} = 3.2 \times 10^{22} (\text{atomes/cm}^3)$$

1.2. GaAs a une structure zinblende et contient 4 atomes de Ga par unité cellulaire .

$$\text{Densité} = \frac{4}{(5.65 \times 10^{-8})^3} = 2.22 \times 10^{22} (\text{atomes/cm}^3)$$

b) Le Germanium a une structure du diamant et a 8 atomes de Ge par maille élémentaire.

$$\text{Densité} = \frac{8}{(5.65 \times 10^{-8})^3} = 4.44 \times 10^{22} (\text{atomes/cm}^3)$$

**Solution d'exercice N° 03 :**

La densité d'états par unité de volume avec des énergies comprises entre 0 et 1 eV

$$N = \int_0^{1\text{eV}} g(E)dE = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^{1\text{eV}} \sqrt{E} \cdot dE$$

$$N = \frac{4\pi(2m_n^*)^{3/2}}{h^3} \cdot \frac{2}{3} \cdot (E)^{3/2}$$

+

$$N = \frac{4\pi(2(9.11 \times 10^{-31}))^{3/2}}{(6.62 \times 10^{-34})^3} \cdot \frac{2}{3} \cdot (1.6 \times 10^{-19})^{3/2}$$

$$N = 4.5 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$$

**Solution d'exercice N° 04 :**

Le nombre d'états quantiques par (cm<sup>3</sup>) dans le silicium entre  $E_c$  et  $E_c + k_B T$  à  $T = 300 \text{ K}$  :

$$= \int_{E_c}^{E_c+k_B T} \frac{4\pi(2m_n^*)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E - E_c} \cdot dE$$

$$N = \frac{4\pi(2m_n^*)^{3/2}}{h^3} \cdot \frac{2}{3} \cdot (E - E_c)^{3/2} \Big|_{E_c}^{E_c+k_B T}$$

$$N = \frac{4\pi(2(1.08)(9.11 \times 10^{-31}))^{3/2}}{(6.62 \times 10^{-34})^3} \cdot \frac{2}{3} \cdot ((0.0259)(1.6 \times 10^{-19}))^{3/2}$$

$$N = 2.12 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$$

Le résultat de cet exemple montre l'ordre de grandeur de la densité d'états quantiques dans un semi-conducteur.

**Solution d'exercice N° 05 :**

On a :

$$\frac{\exp\left[\frac{-(E - E_F)}{k_B T}\right] - \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{(E - E_F)}{k_B T}\right]}}{1 + \exp\left[\frac{(E - E_F)}{k_B T}\right]} = 0.05$$

Si nous multiplions le numérateur et le dénominateur par la fonction  $1 + \exp ( )$ , nous avons

$$\exp\left[\frac{-(E - E_F)}{k_B T}\right] \cdot \left\{1 + \exp\left[\frac{(E - E_F)}{k_B T}\right]\right\} - 1 = 0.05$$

$$\exp\left[\frac{-(E - E_F)}{k_B T}\right] = 0.05$$

$$(E - E_F) = k_B T \ln\left(\frac{1}{0.05}\right) \approx 3k_B T$$

**Solution d'exercice N° 06 :**

La probabilité qu'un état soit vide est :

$$1 - f_F(E) = 1 - \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{(E - E_F)}{k_B T}\right]}$$

AN :

$$0.01 = 1 - \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{(5.95 - 6.25)}{k_B T}\right]}$$

$k_B T = 0.06529$  eV donc la température est  $T = 756$  K.

**Solution d'exercice N° 07 :**

1- La position du niveau de Fermi dans la bande interdite de l'InSb :

$$E_F = \frac{(E_c + E_v)}{2} - \frac{k_B T}{2} \ln\left(\frac{N_c}{N_v}\right), \quad E_F = \frac{(E_c + E_v)}{2} - \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{m_v}{m_c}\right) = \frac{(E_c + E_v)}{2} - \frac{kT}{2} \ln(35)$$

$$E_F = 0.09 + 0.069 = 0.156 \text{ eV}$$

2- La densité effective des états dans la bande de conduction  $N_c$  et dans la bande de valence  $N_v$  :

$$N_c = 2 \left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \quad N_v = 2 \left(\frac{m_v^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$$

$$\frac{N_c}{N_v} = \left(\frac{m_c}{m_v}\right)^{3/2} = 4.83 \times 10^{-3}$$

**Solution d'exercice N° 08:**

La densité effective d'états est :  $N_c = 2 \left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$

Notez qu'à : 300 K,  $k_B T = 26$  meV =  $4 \times 10^{-21}$  J.

pour GaAs :  $m_{hh} = 0.45m_0$ ,  $m_{lh} = 0.08m_0$ , et pour Si  $m_{hh} = 0.5m_0$ ,  $m_{lh} = 0.15m_0$ ,

**Pour GaAs :**

$$N_c = 2 \left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$$

$$N_c = 2 \left(\frac{(1.06)(9.11 \times 10^{-31}) \times 4.16 \times 10^{-21}}{2\pi \times (1.05 \times 10^{-34})^2}\right)^{3/2}$$

$$N_c = 2.78 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$$

**Pour Si :**

$$N_C = 2 \left( \frac{m_e^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}$$

$$N_C = 2 \left( \frac{(0.067)(9.11 \times 10^{-31}) \times 4.16 \times 10^{-21}}{2\pi \times (1.05 \times 10^{-34})^2} \right)^{3/2}$$

$$N_C = 4.45 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$$

Nous pouvons voir la grande différence de densité effective entre Si et GaAs.

Dans le cas de la bande de valence, nous avons les bandes de trous lourds et légers, qui contribuent toutes deux à la densité effective.

La densité effective est :

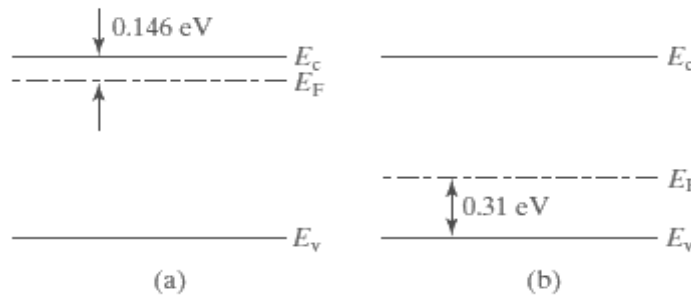
$$N_V(\text{GaAs}) = 7.72 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$$

$$N_V(\text{Si}) = 9.84 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$$

**Solution d'exercice N° 09**

$$E_C - E_F = k_B T \ln \left( \frac{N_C}{n} \right) \quad E_C - E_F = 0.026 \ln \left( \frac{2.8 \times 10^{19}}{10^{17}} \right) = 0.146 \text{ eV}$$

Par conséquent,  $E_F$  est situé à 146 meV en dessous de  $E_C$ , comme illustré à la Fig. (a).



Pour  $p = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ , on a :

$$E_F - E_V = k_B T \ln \left( \frac{N_V}{p} \right) \quad E_F - E_V = 0.026 \ln \left( \frac{1.04 \times 10^{19}}{10^{14}} \right) = 0.31 \text{ eV}$$

Par conséquent,  $E_F$  est situé à 0,31 eV au-dessus de  $E_V$ , comme illustré à la Fig. (b).

**Solution d'exercice N° 10 :**

1. La conductivité et La résistivité d'un semi-conducteur :

$$\sigma = q n \mu_n + q p \mu_p \quad , \quad \rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{q n \mu_n + q p \mu_p}$$



2. Le nombre intrinsèque (cm<sup>-3</sup>) de GaAs à la température ambiante :

$$n_i^2 = N^2 \left[ \frac{m_e}{m_0} \frac{m_t}{m_0} \right]^{\frac{3}{2}} \exp - \frac{E_g}{k_B T_0}$$

$$n_i^2 = (2.5 \times 10^{25})^2 [0.07 \times 0.5]^{\frac{3}{2}} \exp - \left( \frac{1.4}{0.0253} \right)$$

$$n_i = 1.1 \times 10^{12} \text{ m}^{-3}$$

2-La résistivité de l'GaAs :

$$\sigma = q n \mu_n + q p \mu_p = q n_i (\mu_n + \mu_p)$$

**A.N.**  $\sigma_i = 1.6 \cdot 10^{-19} \cdot 1.1 \cdot 10^{12} (0.85 + 0.04) = 1.5 \cdot 10^{-6} / \Omega \cdot \text{m}$

donc résistivité intrinsèque :  $\rho = \frac{1}{\sigma} = 6 \cdot 10^6 \Omega \cdot \text{m}$

a- La densité (cm<sup>-3</sup>) des porteurs positifs et des porteurs négatifs

$$n = N_d = 10^{20} \text{ m}^{-3} ; p = \frac{n_i^2}{n} = \frac{(1.1 \cdot 10^{12})^2}{10^{20}} \quad p = 12100 \text{ m}^{-3}$$

b - La résistivité de l'GaAs dopé

A la température ambiante, la densité des porteurs majoritaires négatifs est donc plus grande que la densité des porteurs minoritaires positifs donc :

$$\sigma = q n \mu_n \quad \sigma = q N_d \mu_n$$

**A.N.**  $\sigma = 1.6 \cdot 10^{-19} \cdot 10^{20} \cdot 0.85 = 13.6 (\Omega \cdot \text{m})^{-1}$  donc  $\rho = \frac{1}{\sigma} = 0.07 \Omega \cdot \text{m}$

**Solution d'exercice N° 11:**

1-La relation d'Einstein :

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{kT}{q}$$

2-L'expression du courant des porteurs majoritaires :

$$J_n = J_{n \text{ deriv}} + J_{n \text{ dif}} = q \mu_n n E + q D_n \frac{dn(x)}{dx}$$

3- L'expression du champ électrique à l'équilibre :

$$q \mu_n n E + q D_n \frac{dn(x)}{dx} = 0 \Rightarrow \mu_n n E = -D_n \frac{dn(x)}{dx}$$

$$E = -\frac{kT}{q} \frac{1}{n(x)} \frac{dn(x)}{dx}$$

4- La valeur de  $l$  et puis celle du champ électrique à l'équilibre :

$$N_D(x = 1 \mu m) = 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$$

$$N_D(x = 0) = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$$

$$\frac{N_D(x=1 \mu m)}{N_D(x=0)} = \frac{5 \times 10^{15}}{5 \times 10^{17}} = e^{\frac{-x}{\lambda}} \Rightarrow \lambda = 0.0217 \mu m$$

$$E = -\frac{kT}{q} (-1/\lambda) = 1.2 \times 10^4 \text{ V/cm}$$

### Solution d'exercice 12 :

1-La tension de diffusion :

$$V_d = k_B T \cdot \ln\left(\frac{N_a x N_d}{n_i^2}\right) = 0.0259 \cdot \ln\left(\frac{5 \times 10^{16} \times 5 \times 10^{15}}{(1.5 \times 10^{10})^2}\right) \quad V_d = 0.718 \text{ V}$$

2-Les épaisseurs de la jonction  $x_n, x_p$  :

$$x_n = W \frac{N_a}{N_a + N_d} = 4.52 \times 10^{-5} \frac{5 \times 10^{16}}{5 \times 10^{15} + 5 \times 10^{16}} \quad x_n = 4.11 \times 10^{-6} \text{ cm}$$

$$x_p = W \frac{N_d}{N_a + N_d} = 4.52 \times 10^{-5} \frac{5 \times 10^{15}}{5 \times 10^{15} + 5 \times 10^{16}} \quad x_p = 4.11 \times 10^{-5} \text{ cm}$$

3- La largeur de la ZCE de la jonction :

$$W = x_n + x_p = 4.11 \times 10^{-5} \text{ cm}$$

5- Le champ maximal  $E_{max}$  :

$$|E_{max}| = \frac{e N_d x_n}{\epsilon_i} = \frac{1.6 \times 10^{-19} \times 5 \times 10^{16} \times 4.11 \times 10^{-5}}{11.7 \times 8.85 \times 10^{-14}}$$

$$|E_{max}| = 3.18 \times 10^4 \text{ V/cm}$$

5-La charge stockée de la jonction  $Q$       $S = \pi (0.05/2)^2 = 1.96 \times 10^{-3} \text{ cm}^2$

$$|Q| = e S x_n N_d = 1.6 \times 10^{-19} \times 1.96 \times 10^{-3} \times 4.11 \times 10^{-6} \times 5 \cdot 10^{15} \quad |Q| = 6.44 \times 10^{-12} \text{ Colomb}$$

6- la capacité de la jonction  $C_j$  :

$$C_j = \frac{\epsilon_i S}{W} = \frac{11.7 \times 8.85 \times 10^{-14} \times 1.96 \times 10^{-3}}{4.52 \times 10^{-11}} \quad C_j = 0.446 \text{ pF}$$

## Références Bibliographiques

1. A Chovet & P. Masson Physique des semi-conducteurs , école polytechnique universitaire de Marseille,2003
2. H. Mathieu, «Physique des semiconducteurs et des composants électroniques», dunod, 6°ed., 2008
3. Kittel, Charles, et al. Physique de l'état solide. Vol. 7. France: Dunod, 1983.
4. Colinge, J.-P. et Colinge, Cynthia A. Physics of semiconductor devices. Springer Science & Business Media, 2005.
5. J. Singh, «semiconductorsdevices: an introduction»,Mc.GrawHill, 1994
6. Rudan, Massimo. Physics of semiconductor devices. New York : Springer, 2015.
7. SZE, Simon M., LI, Yiming, et NG, Kwok K. Physics of semiconductor devices. John wiley & sons, 2007.
8. D.A.Neamen, «semiconductorphysicsand devices: basic principles», Mc.GrawHill, 2003
9. AH. Souici Physique des Semi-conducteurs Université Bejaia 2014
10. Cours de Physique des semiconducteurs, Pr. Rouzeyre, Université de Montpellier II, 1985
11. Mishra, Umesh et Singh, Jasprit. Semiconductor device physics and design. Springer Science & Business Media, 2007.
12. Rockett, Angus. The Materials science of semiconductors. Angus Rockett. 2010.
13. Grundmann, Marius. Physics of semiconductors. Berlin : Springer, 2010.
14. [www.unine.ch/Phys/Enseignement/PhysSemi/Cours/sem/node4.html](http://www.unine.ch/Phys/Enseignement/PhysSemi/Cours/sem/node4.html)
15. [http://www.ni-cd.net/forum/ID99\\_notes-chap2](http://www.ni-cd.net/forum/ID99_notes-chap2)