

Département Micro-électronique et télécommunications

Première année – 2004/2005

# **PHYSIQUE DES SEMI-CONDUCTEURS**



A. Chovet P. Masson

ECOLE POLYTECHNIQUE UNIVERSITAIRE DE MARSEILLE Département Micro-électronique et Télécommunications

### Avertissement

Le présent document est une version modifiée (et adapté à l'Ecole Polytechnique Universitaire de Marseille) du polycopier de cours de physique des semi-conducteurs de l'Ecole Nationale Supérieure d'Electronique et de Radio Electricité de Grenoble (ENSERG ) dispensé par A. Chovet et co-écrit par A. Chovet et P. Masson.

Les auteurs tiennent à remercier par avance les lecteurs qui voudront bien faire part de leurs remarques et corrections éventuelles concernant le fond et la forme du document.

### **Comment nous joindre ?**

Alain CHOVET Professeur	IMEP/LPCS, ENSERG 23 rue des Martyrs, BP 257 38016 Grenoble Cedex 1	
	Tél : 04 76 85 60 41 Fax : 04 76 85 60 70 Email : chovet@enserg.fr	
Pascal MASSON Maître de Conférences	L2MP/Ecole Polytechnique Universitaire de Marseille (MT) IMT, Technopôle de Château Gombert 13451 Marseille Cedex 20	
	Tél : 04 91 05 47 79 Fax : 04 91 05 45 29 Email : pascal.masson@polytech.univ-mrs.fr	

Copyright © 2001 A. Chovet et P. Masson. Tous droits réservés  $1^{ire}$  mise à jour : août 2004

## Table des matières

Chapitre I. Généralités	
I.1. Conducteur - Isolant - Semi-conducteur	
I.2. Structure de l'état solide	
I.3. Système cristallin et réseau cristallin	
Chapitre II. Quelques propriétés	
II.1. Cristal cubique	
II.1.1. Semi-conducteurs de la colonne IV (Ge, Si) - Réseau "diamant" II.1.2. Semi-conducteurs composés (III-V ou II-VI) - Réseau "Zinc-blende"	$\begin{array}{c} 13\\14\end{array}$
II.2. Bandes d'énergie	15
II.3. "Gap" direct ou indirect	16
II.4. Conduction par électron ou par trou. Masse effective. Densité d'états	s 16
Chapitre III. Semi-conducteur non dopé ou dopé	19
III.1. Semi-conducteur intrinsèque	
III.2. Semi-conducteur extrinsèque : dopage	
III.2.1. Semi-conducteur de type $n$	20
III.2.2. Semi-conducteur de type $p$	21
III.3. Semi-conducteur compensé	
Chapitre IV. Semi-conducteur à l'équilibre	
IV.1. Concentration des porteurs libres à l'équilibre	
IV.1.1. Distribution de Fermi-Dirac. Niveau de Fermi	23
IV.1.2. Concentrations à l'équilibre, loi d'action de masse	24
IV.1.3. Equation de la neutralité électrique	26
IV.2. Le niveau de Fermi dans une structure à l'équilibre	
IV.2.1. Propriété fondamentale	27
IV.2.3. Application : "ddp interne" d'une jonction pn à l'équilibre	28 28
Chapitre V. Equation de Poisson - Conséquences	31
Chapitre VI. Perturbations faibles de l'équilibre : transport de c	charges35
VI.1. Mobilité des porteurs libres	35
VI.2. Conduction et conductivité	
VI.3. Diffusion des porteurs	
VI.4. Courant de déplacement	41
VI.5. Transport de charges en présence de champs électrique et magnétic Hall - Magnétorésistance	que. Effet 41

Chapitre VII. Perturbations fortes de l'équilibre : création et dis de porteurs	parition 45
VII.1. Création de porteurs	45
VII.1.1. Création par énergie lumineuse (par photons)	45
VII.1.2. Création par des particules (ou radiations) ionisantes	46
VII.1.3 Création par porteurs "chauds" (champ électrique intense)	47
VII.1.4. Création par injection de porteurs	47
VII.2. Quasi-niveaux de Fermi	
VII.3. Recombinaison (disparition) et durée de vie des porteurs libres	
VII.3.1. Expression de la durée de vie (cas de recombinaison directe)	50
VII.3.2. Durée de vie dans le cas d'une recombinaison indirecte	51
VII.4. Photoconductivité	02 59
VII.5. La luminescence	
VII.5.1. Photoluminescence VII.5.2. Cathodoluminescence	53 53
VII.5.3. Electroluminescence	53
Chapitre VIII. Equations d'évolution (espace et temps)	55
VIII 1 Equations de continuité (ou équations de conservation de chaque t	wno do
porteurs)	55
VIII.2. Equation de conservation de la charge	
VIII.3. Equation de continuité "ambipolaire" (ou généralisée)	
VIII 4 Exemples d'application	57
VIII 4.1 Durée de vie et longueur de diffusion	57
VIII.4.2. Temps de relaxation diélectrique et longueur de Debye	59
Chapitre IX. Fluctuations et bruit électrique	61
IX.1. Bruit de grenaille ("shot noise")	61
IX.2. Bruit thermique (de Nyquist ou de Johnson)	62
IX.3. Bruit de génération - recombinaison (GR)	63
IX.4. Bruit en 1/f (ou de scintillement ou "Flicker noise")	63
Chanitre X. Contact entre deux matériaux différents - Hétérostru	uctures
X.1. Introduction	65
X.2. Travail de sortie - Affinité électronique - Barrière de potentiel	65
X.3. Contact Métal - semi-conducteur réel	
X.3.1. L'oxyde "natif"	66
X.3.2. Les états d'interface (ou états de surface)	67
X.4. Description qualitative de la relation I(V) d'un contact M - SC	
X.4.1. Contact redresseur ("diode SCHOTTKY")	68
X.4.2. Contact ohmique	69
X.5. Hétérojonction	70
X.5.1. Diagramme des bandes d'énergie	70

X.5.2. Applications : localisation et transport des porteurs

## Table des symboles, notations et abréviations

Symboles	unité	signification	
BC	-	Bande de Conduction	
BV	-	Bande de Valence	
$C_{ox}$	Fm <sup>-2</sup>	Capacité d'oxyde	
$D_{n,p}$	$m^2 s^{-1}$	Coefficient de diffusion des électrons (indice n) ou des trous	
		(indice p)	
Ε	J (ou eV)	Energie	
EA	J (ou eV)	Niveau d'énergie des états accepteurs	
Ec	J (ou eV)	Energie du bas de la bande de conduction	
ED	J (ou eV)	Niveau d'énergie des états donneurs	
EF	J (ou eV)	Niveau de Fermi	
${f E_{Fi}}$	J (ou eV)	Niveau de Fermi du matériau intrinsèque	
${ m E_{FM}}$	J (ou eV)	Niveau de Fermi d'un métal	
$\mathbf{E}_{\mathbf{FSC}}$	J (ou eV)	Niveau de Fermi du semi-conducteur	
$\mathbf{E}_{\mathrm{G}}$	J (ou eV)	Gap ou largeur de la Bande Interdite	
${f E}_{i}$	J (ou eV)	Energie du milieu de la bande interdite (Ec+Ev)/2	
$E_V$	J (ou eV)	Energie du haut de la bande de valence	
Ē	Vm <sup>-1</sup>	Champ électrique	
f <sub>n</sub> (E)	-	Probabilité d'occupation d'un niveau d'énergie E par un électron	
f <sub>p</sub> (E)	-	Probabilité d'occupation d'un niveau d'énergie E par un trou	
G <sub>n,p</sub>	$m^{-3}s^{-1}$	Taux de génération d'électrons (indice n) ou de trous (indice p)	
h	$_{ m Js}$	Constante de Planck (6,62×10·34 J.s)	
ħ	Js	Constante de Planck réduite (h/ $2\pi$ )	
ij	Am-2	Densité de courant	
flux	$m^{-2}s^{-1}$	Flux (de porteurs)	
k	JK-1	Constante de Boltzmann (1,38×10 <sup>-23</sup> J.K <sup>-1</sup> )	
L <sub>n,p</sub>	m	Longueur de diffusion des électrons (indice n) ou des trous	
	1	$\frac{(\text{indice } p)}{(1 + 1)^{1/2}}$	
m <sub>n</sub>	kg	Masse effective des electrons	
m <sub>p</sub>	kg	Masse effective des trous	
	$m^{-3}$ (ou cm <sup>-3</sup> )	Concentration en impuretes (dopant) de type accepteur	
	$m^{-3}$ (ou cm <sup>-3</sup> )	Concentration en impuretes ionisees de type accepteur	
	$m^{-3}$ (ou cm <sup>-3</sup> )	Densite d'états equivalente dans la BC, ramenée en $E_C$	
ND NL	$m^{-3}$ (ou cm <sup>-3</sup> )	Concentration en impuretes (dopant) de type donneur	
$N_{D}^{+}$	m <sup>-3</sup> (ou cm <sup>-3</sup> )	Concentration en impuretes ionisees de type donneur	
NV	$m^{-3}$ (ou cm <sup>-3</sup> )	Densite d'etats equivalente dans la BV, ramenée en Ev	
<u>n</u> <sub>0</sub>	m <sup>-3</sup> (ou cm <sup>-3</sup> )	Concentration en electrons libres a l'equilibre thermodynamique	
n(E)	m <sup>-3</sup> J <sup>-1</sup>	Densite energetique des electrons dans la BC	
nc(E)	m <sup>-3</sup> J <sup>-1</sup>	Densite d'etats dans la BC	
n <sub>i</sub>	m <sup>-3</sup> (ou cm <sup>-3</sup> )	Concentration intrinseque de porteurs libres	
nv(E)		Densite a etats dans la BV	
$p_0$	m <sup>-3</sup> (ou cm <sup>-3</sup> )	Concentration en trous libres à l'équilibre thermodynamique	
p(E)	m-oJ-1	Densite energetique des trous dans la BV	
QD O	Cm <sup>-2</sup>	Charge de la zone de desertion	
Q <sub>M</sub>	Cm <sup>-2</sup>	Charge dans le metal	
$Q_{inv}$ ( $Q_n$ , $Q_p$ )	Cm <sup>-2</sup>	Charge de la zone d'inversion	
Q <sub>ox</sub>	Cm <sup>-2</sup>	Charge dans l'isolant (oxyde)	
$(J_{SS} = (J_{i+}))$	Cm <sup>-2</sup>	Charge due aux états de surface = d'interface	

q	С	Valeur absolue de la charge de l'électron (1,6×10 <sup>-19</sup> C)	
$ m R_{H}$	$m^{3}C^{-1}$	Coefficient de Hall	
$R_{n,p}$	$m^{-3}s^{-1}$	Taux de recombinaison des électrons (indice n) et des trous	
		(indice p)	
Т	K	Température absolue	
tox	m	épaisseur d'oxyde	
$ec{\mathbf{V}}$ dn,p	ms <sup>-1</sup> (cms <sup>-1</sup> )	Vitesse de dérive des électrons (indice n) ou des trous (indice p)	
$\vec{v}$ th	ms <sup>-1</sup> (cms <sup>-1</sup> )	Vitesse thermique des porteurs	
V	V	Tension (ddp : différence de potentiel) électrique	
VG	V	Tension entre grille et substrat ("bulk")	
Vox	V	Chute de potentiel aux bornes de l'oxyde	
Vs	V	Potentiel de surface du semi-conducteur	
$\mathbf{x}_{\mathrm{d}}$	m	Etendue de la zone de désertion	
XdM	m	Longueur maximale de la zone de désertion	
<b>E</b> 0	$\mathrm{Fm}^{-1}$	Permittivité du vide (8,85×10 <sup>-12</sup> F.m <sup>-1</sup> )	
ε <sub>ox</sub>	Fm <sup>−1</sup>	Permittivité d'un oxyde ( $\varepsilon_{SiO2} = 3,82\varepsilon_0 \approx 4\varepsilon_0$ )	
ESC	Fm <sup>-1</sup>	Permittivité d'un semi-conducteur (11,9ɛ₀ pour le Silicium)	
$\phi_{\mathrm{F}}$	V	Potentiel "de Fermi" dans le volume du semi-conducteur	
$\Phi_{ m b}$	J (ou eV)	Barrière (de potentiel) dite de "Schottky"	
$\Phi_{\mathrm{M}}$	J (ou eV)	Travail de sortie du métal	
χ	J (ou eV)	Affinité électronique du semi-conducteur	
$\mu_{n,p}$	$m^2 V^{-1} s^{-1}$	Mobilité des électrons (indice n) ou des trous (indice p)	
μн	$m^2 V^{-1} s^{-1}$	Mobilité "de Hall" (µnH, µpH)	
$\rho, \rho(\vec{r})$	Cm <sup>-3</sup>	Densité de charge (au point $\vec{r}$ )	
σ	$\mathrm{Sm}^{\cdot 1}$ ( $\mathrm{Scm}^{\cdot 1}$ )	Conductivité = $1/\text{Résistivité}$ ( $\Omega^{-1}m^{-1}$ )	
τ	s	Durée de vie des porteurs libres	
$ au_{ m diel}$	s	Temps de relaxation diélectrique dans un matériau = $\epsilon_{sc}/\sigma$	
$ au_{ m r}$	s	Temps de relaxation sur le réseau (temps entre deux collisions successives subies par un porteur libre, ou "temps de libre parcours")	

## Chapitre I. Généralités

#### I.1. Conducteurs - Isolants - Semi-conducteurs

Les matériaux ayant la plus faible résistivité à température ambiante, typiquement inférieure à  $10^{-5} \Omega$ cm, sont les métaux (cuivre, or, argent, aluminium...). La conduction électrique s'effectue essentiellement par les électrons libres dont la concentration diffère peu d'un métal à l'autre (de  $10^{22}$  à  $10^{23}$  cm<sup>-3</sup>) quelle que soit sa pureté. Une augmentation de la température provoque une légère augmentation de la résistivité, pouvant s'expliquer par le fait que les électrons libres sont gênés dans leur déplacement par les vibrations (croissantes avec la température) des atomes du métal.

Les matériaux dont la résistivité est typiquement supérieure à  $10^8 \Omega cm$  sont considérés comme isolants ; c'est le cas pour le verre, le mica, la silice (SiO<sub>2</sub>), le carbone (diamant). Cette fois l'augmentation de la température peut provoquer la libération d'électrons (ainsi que de "trous") qui peuvent participer à la conduction électrique, ce qui provoque une baisse de la résistivité avec la température.

Entre les métaux et les isolants se trouvent les semi-conducteurs (SC) dont la résistivité varie de  $10^{-3}$  à  $10^4 \Omega$ cm (ou plus). La conduction électrique se fait par les électrons et les trous, ou de façon préférentielle par l'un ou l'autre type de porteurs. Un semi-conducteur peut être soit pur auquel cas il est dit "intrinsèque", soit dopé par des impuretés (qui permettent de contrôler sa résistivité) auquel cas il est dit "extrinsèque". Si on prend, par exemple, du Silicium assez pur et qu'on lui ajoute un atome de Bore ou de Phosphore pour  $10^5$  atomes de Silicium, sa résistivité passe de  $10^3$  à environ  $10^{-2} \Omega$ cm.

Le tableau (I.1) donne des exemples de matériaux ou de composés semi-conducteurs en fonction des éléments qui les constituent et de la position de ces éléments dans le tableau de Mendeléev.

Colonne		Semi-conducteur
IV		Ge, Si
	binaire	GaAs, GaP, GaSb, InAs, InP, InSb
III-V	ternaire	Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As, GaAs <sub>y</sub> P <sub>1-y</sub>
	quaternaire	Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As <sub>y</sub> P <sub>1-y</sub>
II-VI	binaire	CdS, HgTe, CdTe, ZnTe, ZnS
	ternaire	Cd <sub>x</sub> Hg <sub>1-x</sub> Te

 Tableau I.1.
 Exemples de semi-conducteurs.

#### I.2. Structure de l'état solide

Les matériaux solides se classent en deux grandes catégories qui sont :

• Les matériaux cristallins où les atomes sont rangés régulièrement aux noeuds d'un réseau périodique ; la maille (ou motif) élémentaire se répète régulièrement

• Les matériaux amorphes où l'ordre n'est que local et non répété à "longue distance".

On distingue essentiellement quatre familles de solides cristallins :

- Les cristaux ioniques, par exemple le Na<sup>+</sup>Cl<sup>-</sup> où les ions sont liés par attraction coulombienne. Aucun électron n'est libre ce qui rend ces cristaux isolants et très dur (la liaison est très solide).
- Les cristaux covalents (colonne IV : C, Si, Ge, Sn). Les quatre électrons périphériques sont mis en commun avec quatre voisins et établissent des liaisons de valence. Ces liaisons sont moins fortes que les liaisons ioniques et les propriétés des cristaux vont dépendre de la "force" de ces liaisons (C diamant est isolant, Sn est conducteur).
- Les métaux (Li, Na, K, Cu, Ag, Au) conducteurs électriques qui ont un électron libre par atome. Leur température de fusion est moins élevée que celle des cristaux covalents.
- Les cristaux moléculaires.

#### I.3. Système cristallin et réseau cristallin

Un cristal peut être représenté à partir d'une cellule de base qui est répétée périodiquement, formant ainsi le réseau cristallin. Selon la nature des opérations de symétrie qui laissent la structure cristalline invariante, on est amené à définir sept systèmes cristallins, parmi lesquels le système cubique.

## Chapitre II. Quelques propriétés

#### II.1. Cristal cubique

La plupart des semi-conducteurs cristallisent selon un système cubique. Le système cubique comprend trois réseaux différents possibles, selon la disposition des atomes comme l'indique la figure (II.1)

- Cubique simple : les atomes sont aux sommets du cube (figure (II.1.a)).
- Cubique centré : identique au cubique simple mais avec un atome au centre du cube (figure (II.1.b)).
- Cubique face centrée : identique au cubique simple mais avec un atome au centre de chaque face (figure (II.1.c)).



Figure II.1.a. Cubique simple. b. Cubique centré. c. Cubique face centrée.



Figure II.2. Plans cristallographiques.

La figure (II.2) représente certains plans cristallographiques repérés par leur "indices de Miller". La direction perpendiculaire au plan (h,k,l) se note [h,k,l].

#### II.1.1. Semi-conducteurs de la colonne IV (Ge, Si) - Réseau "diamant"

Les électrons d'un atome isolé prennent des valeurs d'énergie discrètes et chaque niveau d'énergie peut accueillir un nombre limité d'électrons. Ce nombre est égale à  $2n^2$  où n correspond au numéro du niveau (couche) en partant du noyau. Les électrons se répartissent en occupant d'abord les niveaux les plus proches du noyau (ce qui correspond à l'énergie minimale). Dans le cas du Silicium, qui a un numéro atomique Z égal à 14, il y aura 2 électrons sur la première couche (complète), 8 sur la seconde (complète aussi) et 4 sur la dernière qui n'est donc pas pleine puisqu'elle peut contenir jusqu'à 18 électrons. La figure (II.3.a) donne une représentation des niveaux d'énergie et des électrons qui les occupent. Cette représentation est simplifiée à la figure (II.3.b) en considérant seulement les quatre électrons "périphériques" de la couche externe (qui participeront aux liaisons entre atomes).



**Figure II.3.** 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.

On constate qu'un élément présente une grande stabilité quand il a huit électrons sur sa couche externe (structure des gaz rares), ce qui n'est pas le cas de l'**atome** de Silicium isolé. Lors de la formation du **cristal** cet atome va "gagner" quatre électrons en formant des liaisons covalentes qui correspondent à la "mise en commun" de ses électrons périphériques avec les atomes voisins. Ainsi un atome de Silicium qui s'associe avec quatre autres atomes de Silicium "verra" huit électrons sur sa dernière couche. Une telle association est illustrée aux figures (II.4). On constate que si aucune liaison n'est brisée (par exemple à 0 K), il n'y a pas d'électrons libres, et donc le cristal est isolant.

Le système cubique dans lequel va ainsi cristalliser le Silicium, le Germanium (ainsi que C, Sn) est le réseau diamant constitué de deux réseaux cubiques faces centrées imbriqués (décalés du quart de la diagonale principale du cube).



**Figure II.4.** Représentation de l'association d'un atome de Silicium avec ses quatre voisins. **a.** En projection plane. **b.** En trois dimensions.

#### II.1.2. Semi-conducteurs composés (III-V ou II-VI) - Réseau "Zinc-blende"

Un type de liaisons très proche de celui qui vient d'être décrit peut aussi se faire entre atomes de nature différente par exemple entre le Gallium (Z = 31) et l'Arsenic (Z = 33). La figure (II.5) donne la représentation en deux dimensions du semi-conducteur GaAs dans lequel un atome de Ga prend quatre atomes de As comme voisins et l'As quatre atomes de Ga. En réalité, le cristal se construit à partir des ions Ga<sup>•</sup> et As<sup>+</sup> qui ont tous quatre électrons périphériques.



Le réseau correspondant est celui de la blende (minerai de sulfure de zinc : ZnS) qui peut être considéré comme une variante du réseau diamant : pour GaAs, il est constitué de deux réseaux cubiques faces centrées (l'un de Ga et l'autre de As) imbriqués et décalés du quart de la diagonale principale.

#### II.2. Bandes d'énergie

Les électrons d'un atome isolé prennent des niveaux discrets d'énergie (figure (II.3)), qui sont en fait constitués de sous-niveaux (ou sous-couches) ; mais lorsqu'on rapproche deux atomes ces niveaux (ou sous-niveaux) vont se dédoubler. En étendant ce raisonnement à N atomes, cette "dégénérescence" fait apparaître des bandes d'énergie permises, qui peuvent "s'interpénétrer" et se séparer à nouveau lorsque la distance inter-atomique diminue (cf. Fig. (II.6)), donnant des bandes d'énergie interdite, de largeur  $E_G$  ("Gap").

Le tableau (II.1) donne quelques exemples de largeur de bande interdite ainsi que de distances inter-atomique.

atome	<b>E</b> G ( <b>e</b> V)	type de matériau	d (Å)
C (Carbone)	5.5	isolant	3.567
Si (Silicium)	1.1	semi-conducteur	5.431
Ge (Germanium)	0.7	semi-conducteur	5.646
Sn(Etain)	0	conducteur	6.489

**Tableau II.1.** Exemple de valeurs du gap et de la distance inter-atomique ("constante du réseau" = arête du cube du réseau =  $(4/\sqrt{3}) \times$  distance au plus proche voisin).



Figure II.6. Apparition de bandes de valence, de conduction et interdite avec la diminution de la distance inter-atomique pour un matériau de la colonne IV, quand on "rapproche" N atomes identiques.

La figure (II.6) illustre le cas des semi-conducteurs du groupe IV (cas du Silicium) : la bande supérieure est appelée "Bande de Conduction" et, à 0 K, ne contient pas d'électrons contrairement à la bande inférieure, appelée "Bande de Valence", qui contient 4N électrons (donc qui est la dernière bande pleine). Entre ces deux bandes se trouve une zone de largeur  $E_G$  (en J ou en eV) interdite aux électrons et appelée "Bande Interdite" ou "Gap". Le fait que ces deux bandes (BC ou BV) soient entièrement pleines ou vides implique que la conduction électrique ne peut exister.

Pour une température différente de 0 K un électron de la BV peut recevoir suffisamment d'énergie pour passer dans la BC (un "trou" apparaît alors dans la BV) et rendre possible la conduction électrique. Le matériau n'est plus isolant ; mais plus E<sub>G</sub> sera grand plus le nombre de "porteurs libres" (électrons dans la BC ou trous dans la BV) sera faible, et plus le matériau sera isolant.

#### II.3. "Gap" direct ou indirect

Les courbes  $E_{C,V}(\vec{k})$  dites aussi "relations de dispersion" où  $E_C$  est le bas de la bande de conduction,  $E_V$  le haut de la bande de valence et  $\vec{k}$  le vecteur d'onde associé à un électron (quantité de mouvement  $\vec{p} = m\vec{v} = \hbar\vec{k}$ ) font apparaître deux types de semi-conducteur : ceux pour lesquels minimum de  $E_C$  et maximum de  $E_V$  se produisent pour la même valeur de  $\vec{k}$ , que l'on appellera SC à gap direct, et les autres appelés SC à gap indirecte.



Figure II.7.a. SC à gap direct. b. SC à gap indirecte.

La nature du gap joue un rôle fondamental dans l'interaction du semi-conducteur avec un rayonnement électromagnétique (en particulier lumineux), et donc dans le fonctionnement des composants utilisés en optoélectronique. On peut remarquer, pour l'instant, que dans un SC à gap direct un électron du haut de la BV qui acquière une énergie  $E_G$  passe dans la BC sans changer de quantité de mouvement ( $\Delta p = \hbar \Delta k = 0$ ) ce qui n'est pas le cas dans un SC à gap indirect.

On rappelle aussi que lors de toute transition entre niveaux d'énergie, les lois de conservation de l'énergie <u>et</u> de la quantité de mouvement doivent s'appliquer et que la quantité de mouvement associée à un photon :

$$p_{ph} = mc = \frac{mc^2}{c} = \frac{E_{ph}}{c} = \frac{hv}{c} = \frac{h}{\lambda} = \hbar k_{ph}$$
 (II.1)

est typiquement  $10^3$  fois plus petite que celle correspondant aux variations  $\Delta k$  nécessaires dans un SC à gap indirect. Ainsi les photons ne peuvent pas y assurer seul le transfert de quantité de mouvement lors des transitions BC  $\leftrightarrow$  BV.

#### II.4. Conduction par électron ou par trou. Masse effective. Densité d'états



On peut briser une liaison de valence si on apporte une énergie (thermique ou lumineuse) suffisante : on arrache ainsi un ou plusieurs électrons (précédemment engagés dans ces liaisons). Ceci revient, dans le modèle de bandes d'énergie utilisé, à faire passer ce ou ces électrons de la bande de valence à un état situé dans la bande de conduction (à un niveau dépendant de l'apport d'énergie) : l'électron est "libre" (il ne participe plus à une liaison cristalline) et peut, par contre, participer à la conduction électrique, voir figure (II.8). Il se comporte comme une particule "quasi-libre" dans le semi-conducteur car il y subit l'influence du réseau. On représente cette particule (électron) "quasi-libre" par une "quasi-particule" libre en lui affectant une masse "effective"  $m_n$  différente de la masse  $m_0$  (0,91 10<sup>-30</sup> kg) de l'électron libre dans le vide.



Figure II.9. Apparition d'un électron et d'un trou libre lors d'une rupture de liaison covalente.

Dans le même temps qu'apparaît un électron libre dans la bande de conduction (devenu libre en brisant une liaison), apparaît une case (place) vide dans la bande de valence (correspondant à une liaison non assurée) qui peut être occupée par un autre électron de la BV (participant auparavant à une autre liaison covalente). Ce phénomène est illustré à la figure (II.9). A cette place vide (qu'on appelle trou) est affectée une charge positive +q (son déplacement sera opposé à celui des électrons lors de l'application d'un champ électrique). La bande de valence étant toujours quasi-pleine (de N-1 électrons de valence), l'étude du mouvement des particules dans cette bande sera simplifiée en ne considérant que le mouvement du trou auquel on affectera une masse effective  $m_p$ .

Au voisinage d'un extremum des bandes (BV ou BC), on peut approcher les relations de dispersion E(k) par un développement limité : par exemple au voisinage d'un minimum de la BC (appelé "vallée") on pourra écrire :

$$E(k) \approx E_{C} + 0 + \frac{1}{2} \frac{d^{2}E}{dk^{2}} k^{2} + \dots$$
 (II.2)

ou, ce qui est équivalent (avec la quantité de mouvement  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ ) :

$$E(p) - E_C \approx \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial p^2} p^2 = \frac{p^2}{2m_n}$$
(II.3)

(approximation "parabolique" de la bande de conduction); or  $p^2/2m_n$  est l'énergie cinétique d'un électron "libre". Ainsi l'énergie supplémentaire (par rapport à  $E_c$ ) des électrons est une énergie cinétique et on déduit par identification que la masse effective des électrons dans la vallée considérée est donnée par :

$$m_{n} = \left[\frac{\partial^{2} E}{\partial p^{2}}\right]^{-1}$$
(II.4)

qui est l'inverse de la courbure de E(p).

#### **Densité d'états :**

On peut calculer ensuite le nombre de "places" disponibles (occupées ou non) par les électrons (dans la BC) et les trous (dans la BV). Cette "densité d'états" s'obtient par exemple pour les électrons (dans la BC) en écrivant :

 $n_{\rm C}(E)dE$  = nombre d'états (m<sup>-3</sup>) dans la "tranche" d'énergie E, E + dE

(donc  $n_C(E)$  en  $m^{\cdot 3}J^{\cdot 1}$  ou  $cm^{\cdot 3}eV^{\cdot 1}$ ), soit :

$$n_{\rm C}({\rm E})d{\rm E} = g({\rm k})d^3{\rm k} \tag{II.5}$$

où par définition, g(k) est la densité d'états électroniques dans l'espace réciproque ("espace des k"). Dans un espace à trois dimensions cette densité est égale à  $2/(2\pi)^3$ . On en déduit l'expression de la densité d'états dans l'approximation des bandes paraboliques en utilisant le fait que les surfaces isoénergétiques (E = constante), si m<sub>n</sub> est isotrope, sont des sphères dans l'espace des k (alors d<sup>3</sup>k =  $4\pi k^2 dk$  et, d'après l'éq.(II.3),  $dE = (\hbar^2 / m_n)kdk$ ):

$$n_{\rm C}({\rm E}) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_{\rm n}}{\hbar^2}\right)^{3/2} \left({\rm E} - {\rm E}_{\rm C}\right)^{1/2}$$
(II.6)

De même pour les trous dans la bande de valence, on obtient comme densité d'états :

$$n_{\rm V}(\rm E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_{\rm p}}{\hbar^2}\right)^{3/2} (\rm E_{\rm V} - \rm E)^{1/2}$$
(II.7)

### Chapitre III. Semi-conducteur non dopé ou dopé

#### III.1. Semi-conducteur intrinsèque

Un semi-conducteur est dit intrinsèque lorsque le cristal n'est pas pollué (volontairement ou non) par des impuretés pouvant changer la concentration en porteurs libres. Pour une température différente de 0 K, des électrons peuvent devenir "libres" c'est à dire passer de la bande de valence à la bande de conduction, où leur concentration est notée n. Ces électrons laissent des trous dans la BV (avec une concentration notée p) eux-aussi libres de se déplacer avec, de plus, une égalité entre les concentrations n et p. Pour ce cas particulier, on définit une concentration intrinsèque  $n_i$  (égale aux concentrations n et p) pour laquelle on montrera plus loin qu'elle est donnée par la relation :

$$n = p = n_i(T) = AT^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{E_G}{2kT}\right)$$
(III.1)

où A est une constante spécifique du matériau.

L'équation (III.1), illustrée aux figures (III.1.a et b) pour le silicium, le germanium et le GaAs, traduit le fait que plus la température est élevée, plus il est fréquent qu'un électron obtienne l'énergie nécessaire pour franchir la bande interdite. Mais plus le gap (E<sub>G</sub>) est grand et plus l'énergie qu'un électron doit acquérir devient importante. Cette remarque implique qu'un matériau à grand gap a une meilleure stabilité en température ce qui le rend intéressant pour l'électronique de puissance. La figure (III.1.a ou b) montre qu'en première approximation  $\ln(n_i)$  en fonction de 1/T est une droite de pente  $-E_G/2k$  ce qui donne la possibilité de déduire expérimentalement  $E_G$ .



**Figure III.1.** Evolution de la concentration intrinsèque en représentation semi-log pour le silicium, le germanium et le GaAs. **a.** En fonction de la température. **b.** En fonction de l'inverse de la température.

#### Remarque sur la génération et la recombinaison des porteurs :

Si, à une température donnée différente de 0 K, il y a création (ou "génération") thermique permanente de paires électron - trou conduisant à une concentration intrinsèque  $n_i(T)$ , c'est parce que, en régime stationnaire, il existe un phénomène inverse de "disparition" de porteurs (par paire) appelé "recombinaison" : il correspond au passage d'un électron de la bande de conduction à la bande de valence, où l'électron va occuper une "case" vide (l'électron libre va être bloqué dans une liaison de valence). Il y a donc disparition d'une paire électron - trou.

En régime permanents les taux de génération  $g_i(T)$  et de recombinaison  $r_i(T)$  (en m<sup>-3</sup>s<sup>-1</sup>) doivent être égaux, et pour un semi-conducteur intrinsèque :

$$g_i(T) = r_i(T) \propto n_i^2 \propto \exp\left(-\frac{E_G}{kT}\right)$$
 (III.2)

#### III.2. Semi-conducteur extrinsèque : dopage

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



**Figure III.2.** Silicium dopé au phosphore. **a.** T = 0 K. **b.**  $T \neq 0$  K.



**Figure III.3.** Diagrammes de bandes faisant apparaître le niveau d'énergie des états de type donneur et leur occupation. **a.**  $T_0 = 0$  K,  $n_0 = p_0 = 0$ . **b.**  $0 < T_1 < 50$  K, les impuretés s'ionisent (se dégèlent). **c.** 50 K  $< T_2 < 500$  K,  $n_0 \approx N_D >> n_i(T_2) >> p_0$ . **d.**  $T_3 > 500$  K,  $n_0 \approx p_0 \approx n_i(T_3)$ .

#### III.2.1. Semi-conducteur de type *n*

Pour un tel matériau, des atomes (ou impuretés) de type donneur (d'électrons) ont été introduits (en général en faible quantité) afin de privilégier la conduction par électrons plutôt que par trous. Les atomes peuvent être de la colonne V si le cristal initial est constitué d'atomes de la colonne IV. La figure (III.2.a) donne l'exemple de silicium dopé au phosphore qui possède cinq électrons sur la couche externe. Les quatre atomes voisins de silicium "prêtent" un électron chacun à l'atome de phosphore qui lui-même met en commun quatre de ses cinq électrons périphériques. Un faible apport d'énergie (0,04 eV), par exemple dû à une température différente de 0 K, peut "libérer" le cinquième électron de l'atome de phosphore (figure (III.2.b)) qui se retrouve alors ionisé positivement (charge fixe). Ce phénomène correspond à l'apparition d'un niveau d'énergie Ep dans la bande interdite (avec  $E_C - E_D = 0,04 \text{ eV}$ ), représenté à la figure (III.3). Les atomes d'impureté s'ionisent progressivement avec l'augmentation de la température et à partir d'environ 50 K toutes les impuretés sont "dégelées". La concentration n<sub>0</sub> en électrons (appelée concentration en porteurs "majoritaires") sera alors égale à la concentration en dopant N<sub>D</sub> (n<sub>0</sub> = N<sub>D</sub> >> n<sub>i</sub> >> p<sub>0</sub> concentration en trous, minoritaires) tant que le comportement intrinsèque du matériau ne reprend pas le dessus (équation (III.1)) ce qui se produit pour une température supérieure à 500 K (ordre de grandeur usuel) et rend à nouveau la concentration en électrons dépendante de la température.

#### III.2.2. Semi-conducteur de type p



**Figure III.4.** Silicium dopé au Bore. **a.** T = 0K. **b.**  $T \neq 0K$ .



**Figure III.5.** Diagrammes de bandes faisant apparaître le niveau d'énergie des états de type accepteur et leur occupation. **a.**  $T_0 = 0K$ ,  $n_0 = p_0 = 0$ . **b.**  $0 < T_1 < 50$  K, les impuretés s'ionisent. **c.**  $50 \text{ K} < T_2 < 500 \text{ K}$ ,  $p_0 \approx N_A \gg n_i(T_2) \gg n_0$ . **d.**  $T_3 > 500 \text{ K}$ ,  $n_0 \approx p_0 \approx n_i(T_3)$ .

Cette fois les impuretés sont de type accepteur d'électrons ce qui correspond aux atomes de la colonne III pour un cristal constitué d'atomes de la colonne IV. La figure (III.4) donne un aperçu de ce qui se passe pour un cristal de silicium dans lequel on a introduit des atomes de bore. L'association avec ses quatre voisins confère à l'atome de bore sept électrons sur la couche externe ce qui est insuffisant pour le rendre stable et il est alors tenté d'en subtiliser un à un proche voisin qui lui même peut en prendre un à un de ses voisins et ainsi de suite. Pour cela il faut un apport minimum d'énergie qui peut être fourni par les vibrations thermiques du cristal ; le bore se retrouve ionisé négativement (charge fixe) et on assiste au déplacement d'un trou (libre) d'atome en atome. La concentration  $p_0$  en trous (porteurs majoritaires) est égale à la concentration en dopant  $N_A$  ( $p_0 = N_A >> n_i >> n_0$ ) à partir d'une température de l'ordre de 50 K; le caractère intrinsèque redevient dominant au-delà de 500 K environ (équation (III.1)).

#### <u>Remarques :</u>

Le dopage minimum dépend du raffinage du matériau; par exemple pour le silicium on observe des concentrations résiduelles de bore d'environ  $10^{13}$  atomes par cm<sup>3</sup>, si bien que le silicium intrinsèque à température ambiante (où n<sub>i</sub>  $\approx 10^{10}$  cm<sup>-3</sup>) est très difficile à obtenir.

D'autre part, certaines impuretés (métalliques) ou des défauts du réseau cristallin donnent des niveaux d'énergies plus proches du milieu de la bande interdite ce qui a peu d'intérêt au niveau dopage mais est susceptible de modifier les propriétés de recombinaison ; on dit que ces niveaux "profonds" constituent des "centres de recombinaison".

#### III.3. Semi-conducteur compensé

Les impuretés dopantes (ou même profondes) de **type différent** peuvent se compenser, partiellement ou totalement. Le semi-conducteur aura le type de l'impureté dominante. Si on arrive à compenser parfaitement ( $N_A = N_D$ ), on obtient alors un semi-conducteur "intrinsèque par compensation" (...bien qu'il contienne des impuretés dopantes).



**Figure III.6.** Diagramme de bandes d'un semi-conducteur de type n en partie compensé  $(N_A < N_D)$ . **a.**  $T_0 = 0K$ . **b.**  $T_1 > 50$  K : le dopage équivalent (à température "ambiante") est  $(N_D - N_A) \approx n_0$ .

### Chapitre IV. Semi-conducteur à l'équilibre

#### IV.1. Concentration des porteurs libres à l'équilibre

On rappelle qu'à l'équilibre thermodynamique, un phénomène et son phénomène "inverse" (par exemple : un mouvement de particules de la droite vers la gauche ou de la gauche vers la droite) se produisent avec la même probabilité.

Les électrons, particules à spin demi-entier, obéissent à la statistique de Fermi - Dirac.

#### IV.1.1. Distribution de Fermi-Dirac. Niveau de Fermi

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

$$f_n(E) = \frac{\text{nombre de cases occupées par les électrons (entre E et E + dE)}}{\text{nombre de cases disponibles (entre E et E + dE)}} = \frac{n(E)dE}{n_C(E)dE}$$
(IV.1)

$$f_{n}(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_{F}}{kT}\right)}$$
(IV.2)

 $E_F$  étant le niveau de Fermi, qui correspond à une probabilité d'occupation égale à 1/2, quelle que soit la température T. La figure (IV.1) donne l'évolution de  $f_n(E)$  en fonction de la différence  $E - E_F$  et de la température. Elle permet de constater que sa valeur varie plus ou moins rapidement de 1 à 0 en passant toujours par 0,5 pour  $E - E_F = 0$ .



**Figure IV.1.** Evolution de la probabilité  $f_n(E)$  en fonction de  $E - E_F$  et de la température.

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

$$f_{p}(E) = 1 - f_{n}(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_{F} - E}{kT}\right)}$$
 (IV.3)

Dans le cas où la différence  $E - E_F$  est supérieure à quelques kT, l'équation (IV.2) se simplifie en constatant que le terme en exponentiel est fortement supérieur à 1 d'où :

$$f_{n}(E) \approx \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_{F}}{kT}\right)} = \exp\left(-\frac{E - E_{F}}{kT}\right)$$
(IV.4)

ce qui correspond à la statistique de Boltzmann.

Dans le cas où  $E - E_F$  est inférieur à quelques -kT ( $\Leftrightarrow E_F - E$  supérieur à quelques kT) on a l'approximation suivante :

$$f_{p}(E) \approx \frac{1}{\exp\left(\frac{E_{F}-E}{kT}\right)} = \exp\left(-\frac{E_{F}-E}{kT}\right)$$
 (IV.5)

Pour un semi-conducteur intrinsèque le niveau de Fermi est appelé "niveau de Fermi intrinsèque"  $E_{Fi}$  et se situe près du milieu de la bande interdite  $E_i = (E_C + E_V)/2$ . Mais dans le cas général, le niveau de Fermi va dépendre du type de dopant et de sa concentration (et, bien sûr, de la température). Ce que l'on peut dire avec certitude, c'est que pour un semi-conducteur de type  $n : E_F > E_{Fi}$  (qui traduit le fait que les électrons sont plus nombreux que les porteurs intrinsèques :  $n_0 >> n_i$ ) et pour un semi-conducteur de type  $p : E_F < E_{Fi}$ .

#### IV.1.2. Concentrations à l'équilibre, loi d'action de masse

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

$$n_0 = \int_{BC} n(E) dE = \int_{E_C}^{E_{max}} n_C(E) f_n(E) dE \cong \int_{E_C}^{\infty} n_C(E) f_n(E) dE$$
(IV.6)

où n(E) représente la distribution en énergie (ou densité énergétique) des électrons dans la bande de conduction. Pour pouvoir effectuer l'intégration, on considère que le semi-conducteur n'est pas dégénéré, c'est-à-dire que le niveau de Fermi reste dans la bande interdite en respectant les inégalités  $E_C - E_F > qqs kT$  et  $E_F - E_V > qqs kT$ . En utilisant alors l'expression correspondante de  $f_n(E)$  (équation (IV.4), dite "approximation de Boltzmann") et celle de  $n_C(E)$  (équation (II.6)) on intègre l'équation (IV.6) pour obtenir :

$$n_0 = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{kT}\right) = N_C f_n(E_C)$$
(IV.7)

où N $_{\rm C}$  (cm-3) est la densité équivalente d'états dans la bande de conduction ramenée en  $E_{\rm C}$  et vaut :

$$N_{\rm C} = 2 \left(\frac{2\pi m_{\rm n} kT}{h^2}\right)^{3/2}$$
(IV.8)

Pour trouver la densité de trous dans la bande de valence il faut procéder de la même façon que pour les électrons mais en utilisant la densité d'états nv(E) et la probabilité d'occupation  $f_p(E)$ .

Physique des semi-conducteurs – A Chovet & P. Masson

$$p_0 = \int_{BV} p(E) dE = \int_{E_{\min}}^{E_V} n_V(E) f_p(E) dE \cong \int_{-\infty}^{E_V} n_V(E) f_p(E) dE$$
(IV.9)

où p(E) est la densité énergétique des trous dans la bande de valence. Les expressions de nv(E) (équation (II.7)) et de  $f_p(E)$  pour le cas d'un semi-conducteur non dégénéré (équation (IV.5)) permettent d'intégrer l'équation (IV.9).

$$p_0 = N_V \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{kT}\right) = N_V f_p(E_V)$$
(IV.10)

où Nv (cm<sup>-3</sup>) est la densité équivalente d'états dans la bande de valence ramenée en Ev.

$$N_{\rm V} = 2 \left(\frac{2\pi m_{\rm p} kT}{h^2}\right)^{3/2}$$
(IV.11)

La figure (IV.2) montre la répartition qualitative des électrons et des trous libres dans la BC et la BV.



**Figure IV.2.** Diagramme faisant apparaître la fonction de Fermi et la densité énergétique des porteurs libres.

En multipliant la densité d'électrons par la densité de trous (équations (IV.7) et (IV.10)) on obtient un résultat indépendant de la position du niveau de Fermi (et donc du dopage). Cette loi est appelée "loi d'action de masse".

$$n_0 p_0 = N_C N_V \exp\left(-\frac{E_C - E_V}{kT}\right) = N_C N_V \exp\left(-\frac{E_G}{kT}\right)$$
(IV.12)

Dans un matériau intrinsèque les concentrations en porteurs libres sont égales à la concentration intrinsèque de porteurs  $n_i$  ce qui permet d'écrire

$$n_i = p_0 = n_0 = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_{Fi}}{kT}\right)$$
 (IV.13)

et avec l'équation (IV.12) :

$$n_0 p_0 = N_C N_V \exp\left(-\frac{E_G}{kT}\right) = n_i^2(T)$$
 (IV.14)

Ce résultat permet d'exprimer la concentration intrinsèque de porteurs sous la forme (déjà indiquée : équation (III.1)) :

$$n_{i} = \sqrt{N_{c}N_{v}} \exp\left(-\frac{E_{G}}{2kT}\right) \propto T^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{E_{G}}{2kT}\right)$$
(IV.15)

car  $N_{C,V} \propto (m_{n,p}T)^{3/2}$ .

On exprime aussi le niveau de Fermi intrinsèque en fonction de  $N_C$  et  $N_V$  en égalant  $n_i$  et  $n_0$  ou  $p_0$ .

$$N_{C} \exp\left(-\frac{E_{C} - E_{Fi}}{kT}\right) = \sqrt{N_{C} N_{V}} \exp\left(-\frac{E_{C} - E_{V}}{2kT}\right)$$
(IV.16)

$$E_{Fi} = \frac{E_C + E_V}{2} - \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{N_C}{N_V}\right) = E_i - \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{N_C}{N_V}\right) \approx E_i$$
(IV.17)

où  $E_i = (E_C + E_V)/2$  est le milieu de la bande interdite.

On exprime la densité  $n_0$  en fonction de  $n_i$  en écrivant dans l'équation (IV.7) :

$$E_{C} - E_{F} = (E_{C} - E_{Fi}) + (E_{Fi} - E_{F})$$
 (IV.18)

et en utilisant l'équation (IV.13) :

$$n_0 = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_{Fi}}{kT}\right) \exp\left(-\frac{E_{Fi} - E_F}{kT}\right) = n_i(T) \exp\left(\frac{E_F - E_{Fi}}{kT}\right)$$
(IV.19)

Cette équation (IV.19) confirme que si  $n_0 > n_i$  alors  $E_F > E_{Fi}$ .

L'expression de  $p_0$  en fonction de  $n_i$  est :

$$p_0 = n_i (T) \exp\left(-\frac{E_F - E_{Fi}}{kT}\right) = \frac{n_i (T)^2}{n_0}$$
(IV.20)

#### IV.1.3. Equation de la neutralité électrique

Dans un semi-conducteur **homogène** la somme de toutes les charges est nulle en tout point ce qui signifie que le nombre de trous libres et de charges fixes positives est égal au nombre d'électrons libres et de charges fixes négatives.

$$p_0 + N_D^+ = n_0 + N_A^-$$
 (IV.21)

 $N_D^+$  et  $N_A^-$  représentent les impuretés ionisées. Les atomes de type donneur sont neutres lorsqu'ils sont occupés par leur électron et sont ionisés positivement quand ils ont donné leur électron c'est-à-dire lorsqu'ils sont "occupés par un trou". Pour en trouver le nombre il faut multiplier le nombre de places possibles  $(N_D)$  par la probabilité d'occupation du niveau d'énergie  $E_D$  par un trou  $(f_p(E_D))$ , c'est-à-dire (si on supposait qu'il n'y a pas de dégénérescence du niveau d'impureté) :

Physique des semi-conducteurs – A Chovet & P. Masson

$$N_{D}^{+} = N_{D}f_{p}(E_{D}) = N_{D}\frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_{F} - E_{D}}{kT}\right)}$$
 (IV.22)

Pour les atomes de type accepteur, chargés négativement quand ils ont capté un électron, il faut utiliser la probabilité d'occupation du niveau  $E_A$  par un électron ( $f_n(E_A)$ ) multipliée par le nombre de places disponibles ( $N_A$ ).

$$N_{A}^{-} = N_{A}f_{n}(E_{A}) = N_{A} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_{A} - E_{F}}{kT}\right)}$$
 (IV.23)

A température ambiante, dans le cas d'un semi-conducteur de type n, l'équation de la neutralité se simplifie en considérant que  $N_A$  est négligeable et que toutes les impuretés (donatrices) sont ionisées  $N_D^+ = N_D$ . D'où :

$$n_0 = p_0 + N_D = \frac{n_i^2}{n_0} + N_D$$
 (IV.24)

équation d'où on peut exprimer la concentration en porteurs libres en fonction de  $n_i(T)$  et du dopage. Comme en général dans ce type de semi-conducteur  $n_0 >> p_0$  alors l'équation (IV.24) se résume à :

$$n_0 \approx N_D \tag{IV.25}$$

L'expression du niveau de Fermi s'obtient en utilisant les équations (IV.25) et (IV.7) ou (IV.19).

$$E_{F} = E_{C} - kT \ln\left(\frac{N_{C}}{N_{D}}\right) = E_{Fi} + kT \ln\left(\frac{N_{D}}{n_{i}}\right)$$
(IV.26)

Pour un semi-conducteur de type p on a à température ambiante  $\, {\bf p}_0 \approx {\bf N}_{\rm A} \,$  ce qui donne :

$$E_{F} = E_{V} + kT \ln\left(\frac{N_{V}}{N_{A}}\right) = E_{Fi} - kT \ln\left(\frac{N_{A}}{n_{i}}\right)$$
(IV.27)

#### IV.2. Le niveau de Fermi dans une structure à l'équilibre

#### IV.2.1. Propriété fondamentale

Quelle que soit la structure du matériau (homogène ou non), le niveau de Fermi est le même partout à l'équilibre thermodynamique.

Pour vérifier ce fait on imagine deux régions de la structure notées 1 et 2 vérifiant l'égalité  $E_1 - E_{F1} = E_2 - E_{F2}$  (cf. Fig. (IV.3)) ce qui signifie que la concentration en électrons est la même sur  $E_1$  et sur  $E_2$ . Si on suppose que  $E_{F1} < E_{F2}$ , alors  $E_1 < E_2$ , ce qui implique un mouvement d'électrons de la région 2 vers la région 1 soit un flux d'électrons et qui dit flux dit non équilibre thermodynamique. Donc à l'équilibre, on doit avoir  $E_{F1} = E_{F2} = E_F = \text{constante}$ .



**Figure IV.3.** Structure comprenant deux régions vérifiant l'égalité  $E_1 - E_{F1} = E_2 - E_{F2}$ .

#### **IV.2.2. Illustrations**

La figure (IV.4.a) donne un exemple de diagramme de bandes impliquant un équilibre thermodynamique puisque le niveau de Fermi ne varie pas selon l'axe x. Le fait que E<sub>G</sub> reste constant peut signifier que le matériau est "le même", mais que son dopage n'est pas uniforme. La plus forte concentration d'électrons à gauche et de trous à droite vient de la statistique de Fermi (f<sub>n</sub>(E) et f<sub>p</sub>(E)). Dans la partie gauche le semi-conducteur est de type n (E<sub>F</sub> plus proche de E<sub>C</sub> que de E<sub>V</sub>) alors que dans la partie droite il est de type p. On peut montrer que la variation linéaire de E<sub>C</sub> – E<sub>F</sub> correspond à un dopage variant de façon exponentielle.



**Figure IV.4.a.** Semi-conducteur à l'équilibre thermodynamique. **b.** Semi-conducteur hors équilibre thermodynamique.

La variation de  $E_F$  en fonction de x à la figure (IV.4.b) indique que le semi-conducteur n'est pas à l'équilibre thermodynamique ce qui se traduit par un flux d'électrons et de trous. On peut vérifier que cette figure correspond à un échantillon SC homogène soumis à une différence de potentiel entre ses deux extrémités.

#### IV.2.3. Application : "ddp interne" d'une jonction pn à l'équilibre

La figure (IV.5) illustre le cas d'un semi-conducteur non homogène constitué de deux parties A et B homogènes. A l'équilibre thermodynamique (pas de différence de potentiel extérieure) le niveau de Fermi doit être le même tout au long de la structure. Entre les deux régions homogènes existe toutefois une barrière de potentiel "interne"  $V_{int} = V_{AB}$ , associée à un champ électrique interne dans la zone de transition :

$$V_{int} = V_{AB} = V_A - V_B = -\frac{1}{q} (E_{CA} - E_{CB}) = -\frac{1}{q} (E_{VA} - E_{VB}) = -\frac{1}{q} (E_{FiA} - E_{FiB})$$
(IV.28)

En utilisant l'équation (IV.19) on a l'expression du niveau de Fermi intrinsèque en fonction du niveau de Fermi et de la densité en électrons pour les deux parties du semi-conducteur.

$$\mathbf{E}_{\mathrm{FiA}} = \mathbf{E}_{\mathrm{F}} - \mathbf{k} T \ln \left( \frac{\mathbf{n}_{0\mathrm{A}}}{\mathbf{n}_{\mathrm{i}}} \right) \tag{IV.29}$$

Physique des semi-conducteurs - A Chovet & P. Masson

$$E_{FiB} = E_F - kT \ln\left(\frac{n_{0B}}{n_i}\right)$$
(IV.30)

En reportant ces deux résultats dans l'équation (IV.28) on obtient l'expression de la différence de potentiel interne (qui peut aussi être exprimée à l'aide de la densité en trous (éq. (IV.20))) :

$$V_{int} = \frac{kT}{q} ln \left( \frac{n_{0A}}{n_{0B}} \right) = \frac{kT}{q} ln \left( \frac{p_{0B}}{p_{0A}} \right) = \frac{kT}{q} ln \left( \frac{n_{0A} p_{0B}}{n_i^2} \right) = \frac{kT}{q} ln \left( \frac{n_i^2}{p_{0A} n_{0B}} \right)$$
(IV.31)

Cette différence de potentiel interne ("built-in potential") est aussi appelée différence de potentiel "de contact" ou "de diffusion". Elle correspond à la barrière de potentiel que doivent franchir les électrons pour passer de A vers B (et les trous de B vers A). Elle n'est pas mesurable puisqu'elle correspond à une situation d'équilibre ( $E_{FA} = E_{FB} = E_F$  aucune ddp. "n'apparaît" entre les extrémités).



**Figure IV.5.** Structure (ex. : 'jonction pn') à l'équilibre thermodynamique constituée de deux parties homogènes (même semi-conducteur dopé différemment).

### Chapitre V. Equation de Poisson - Conséquences

On commence par rappeler les deux points suivants :

- Un matériau SC homogène est neutre en tout point (neutralité électrique locale)
- Lorsqu'un matériau est non homogène il y a une possibilité d'existence d'un champ électrique **interne**  $\vec{E}$  associé à celle d'une densité de charge  $\rho(\vec{r})$  dans une "zone de charge d'espace" (ZCE).

#### Théorème de Gauss et équation de Poisson

Soit un volume V délimité par une surface fermée S contenant une charge Q, le flux du champ électrique sortant s'écrit :

$$\iint_{S} \vec{\xi} \vec{n} dS = \frac{Q}{\epsilon_{SC}} = \frac{\iiint_{V} \rho(\vec{r}) dV}{\epsilon_{SC}} = \iiint_{V} div(\vec{\xi}) dV$$
(V.1)

 $\vec{n}$  est le vecteur unitaire normal à la surface,  $\varepsilon_{sc}$  la permittivité du matériau (SC), dS un élément de surface et dV un élément de volume.

Dans ce volume dV du matériau la densité de charge  $\rho$  s'écrit en fonction des densités en porteurs libres et des charges fixes :

$$\rho(\vec{r}) = q \left[ N_{D}^{+} + p - N_{A}^{-} - n \right]$$
 (V.2)

Les équations (V.1) et (V.2) permettent d'écrire :

$$\vec{\nabla}\vec{\xi} = \operatorname{div}\left(\vec{\xi}\right) = \frac{\rho(\vec{r})}{\varepsilon_{\mathrm{SC}}} = \frac{q}{\varepsilon_{\mathrm{SC}}} \left[ N_{\mathrm{D}}^{+} + p - N_{\mathrm{A}}^{-} - n \right]$$
(V.3)

Le champ électrique et la tension électrique V étant reliés par :

$$\vec{\xi} = -\operatorname{grad}(V) = -\vec{\nabla}(V)$$
 (V.4)

l'équation de Poisson s'exprime de la façon suivante :

$$\Delta V = \nabla^2 V = \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} = -\frac{q}{\epsilon_{\rm SC}} \left[ N_{\rm D}^{\ +} + p - N_{\rm A}^{\ -} - n \right] \tag{V.5}$$

Pour une analyse à une seule dimension, x par exemple, cette équation devient :

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\frac{\partial \xi_x}{\partial x} = -\frac{q}{\epsilon_{SC}} \left[ N_D^+(x) + p(x) - N_A^-(x) - n(x) \right]$$
(V.6)

L'équation de Poisson montre que dans une région neutre ( $\rho = 0$ ), l'évolution du potentiel V(x) ne pourra être, au plus, qu'une fonction linéaire de x.

Inversement dans une zone de charge d'espace ( $\rho \neq 0$ ), l'évolution du potentiel présente une courbure ( $d^2V/dx^2 \neq 0$ ), et donc l'évolution des bandes d'énergie  $E_C(x)$ ,  $E_V(x)$ ,... (Fig. (V.1)), directement liée à celle du potentiel V(x), va reproduire cette courbure car :  $-qdV(x) = dE_C(x) = dE_V(x) = dE_i(x)$ .



**Figure V.1.** Courbures des bandes d'énergies dans une zone de charge d'espace (Z.C.E).

De plus, si la structure étudiée **reste "à l'équilibre"** (au moins selon la direction étudiée x), la statistique de Fermi-Dirac est applicable et  $E_F$  = constante. En tout point x de la ZCE, on peut alors écrire :

$$\begin{split} \mathbf{n}(\mathbf{x}) &= \mathbf{N}_{\mathrm{C}} \exp\left(-\frac{\mathbf{E}_{\mathrm{C}}(\mathbf{x}) - \mathbf{E}_{\mathrm{F}}}{\mathbf{k}\mathrm{T}}\right) = \mathbf{N}_{\mathrm{C}} \exp\left(-\frac{\mathbf{E}_{\mathrm{C}}(\mathbf{x}) - \mathbf{E}_{\mathrm{C0}} + \mathbf{E}_{\mathrm{C0}} - \mathbf{E}_{\mathrm{F}}}{\mathbf{k}\mathrm{T}}\right) \\ &= \mathbf{n}_{0} \exp\left(-\frac{\mathbf{E}_{\mathrm{C}}(\mathbf{x}) - \mathbf{E}_{\mathrm{C0}}}{\mathbf{k}\mathrm{T}}\right) = \mathbf{n}_{0} \exp\left(\frac{q\mathbf{V}(\mathbf{x})}{\mathbf{k}\mathrm{T}}\right) \end{split} \tag{V.7}$$

où  $n_0$  est la concentration en électrons dans la région (où  $E_C = E_{C0}$ ) choisie comme référence (en général le "volume neutre").

De même, on peut écrire pour les trous :

$$p(\mathbf{x}) = \mathbf{p}_0 \exp\left(-\frac{q\mathbf{V}(\mathbf{x})}{\mathbf{kT}}\right) \tag{V.8}$$

On remarquera que le produit  $n(x)p(x) = n_0p_0 = n_i^2$ , ce qui est normal puisqu'on a supposé que la structure considérée est à l'équilibre.

On peut donc théoriquement connaître l'évolution du potentiel le long de l'axe x : V(x) par résolution de l'équation de Poisson (équation (V.6)). Ceci n'est analytiquement simple que dans certains cas, tels :

La région neutre ou "quasi-neutre": à l'équilibre (n<sub>0</sub>, p<sub>0</sub>) ou hors équilibre (n = n<sub>0</sub> + δn, p = p<sub>0</sub> + δp) la densité de charge s'écrit (charge nulle) :

$$\rho(\vec{r}) = q \left[ N_{D}^{+} + p - N_{A}^{-} - n \right] \cong 0$$
 (V.9)

sans oublier qu'à l'équilibre  $p_0 - n_0 = N_A^- - N_D^+$ , ce qui impliquera  $\delta n \cong \delta p$ .

La région (ou zone) de charge d'espace (ZCE) désertée : en général le champ interne y est élevé et il va éjecter les porteurs hors de la région de charge d'espace, permettant de faire *l'hypothèse de désertion totale*. Les densités en électrons et en trous sont donc considérées comme nulles (n ≅ 0, p ≅ 0) et la densité de charge se simplifie :

$$\rho(\vec{\mathbf{r}}) = q \left[ N_{\rm D}^{+}(\vec{\mathbf{r}}) - N_{\rm A}^{-}(\vec{\mathbf{r}}) \right] \tag{V.10}$$



Un exemple de semi-conducteur présentant une ZCE (zone de charge d'espace) est donné à la figure (V.2) où la différence de potentiel entre le point x et le point  $x = \infty$  est notée V(x).

Une concentration  $N_A$ , supposée constante, d'impuretés acceptrices a été introduite dans le matériau, d'où l'expression de la densité de charge dans la ZCE :

$$\rho(\mathbf{x}) = -qN_{\mathrm{A}} \tag{V.11}$$

$$\frac{\partial^2 V(x)}{\partial x^2} = -\frac{\partial \xi_x(x)}{\partial x} = -\frac{\rho(x)}{\epsilon_{SC}} = \frac{q}{\epsilon_{SC}} N_A$$
(V.12)

En intégrant une première fois l'équation (V.12), on obtient :

$$\frac{\partial V(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = -\xi_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) = \frac{qN_{A}}{\epsilon_{SC}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{d}) \qquad (V.13)$$

avec en  $x = x_d$  la condition de champ électrique nul ( $\xi = 0$  dans la région neutre :  $x \ge x_d$ ).

L'intégration de l'équation (V.13) mène à :

**Figure V.2.** Exemple de semi-conducteur contenant une zone de charge d'espace et une zone quasi neutre.

$$V(x) = \frac{qN_A}{2\varepsilon_{SC}} (x - x_d)^2 \qquad (V.14)$$

avec en  $x = x_d$  une différence de potentiel nulle (pas de chute de potentiel entre  $x = x_d$  et  $x \to \infty$ ). La distance  $x_d$  s'exprime donc facilement en fonction de la différence de potentiel en x = 0 qui sera notée  $V_0$  (et qui correspond à la ddp. aux bornes de la ZCE).

$$V_0 = \frac{qN_A}{2\varepsilon_{SC}} x_d^2 = \frac{1}{2} E_{x \max} x_d$$
(V.15)

soit:

$$x_{d} = \sqrt{\frac{2\varepsilon_{SC}}{qN_{A}}}V_{0}$$
(V.16)

Ordre de grandeur de l'étendue d'une zone désertée : dans le silicium ( $\epsilon_{SC} \approx 12 \epsilon_0$ ), pour  $N_{A,D} \approx 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  (dopage relativement faible), et  $V_D \approx 1 \text{ V}$ , on a  $x_d \approx 1 \mu m$ .

**N.B. :** la transition entre la ZCE et la région quasi-neutre n'est en réalité, pas brutale ; elle s'effectue sur une zone dite "couche de Debye" qui sera plus précisément définie au paragraphe VIII.4.2

## Chapitre VI. Perturbations faibles de l'équilibre : transport de charges

Hors champ électrique, les porteurs libres ont un mouvement ressemblant à des sauts de puce (caractérisé par des changements de direction que l'on appelle "mouvement Brownien"), et leur déplacement moyen est nul. Les atomes, les impuretés et les défauts du réseau sont autant d'obstacles pour les porteurs, qui effectuent des "collisions" avec eux. Le temps moyen entre collisions,  $\tau_r$  (ou "temps de relaxation" sur le réseau), est de l'ordre de  $10^{-13}$  s (0,1 ps). Notons que le processus de collisions peut être décrit comme un processus poissonnien de densité  $(1/\tau_r)$ , c'est-à-dire que la probabilité d'observer une collision pendant un intervalle de temps dt (très petit) est  $(1/\tau_r)\times dt$ ;  $1/\tau_r$  correspond donc au nombre moyen de collisions par unité de temps, et  $\tau_r$  est la valeur moyenne de la variable aléatoire "temps entre 2 collisions successives". Remarquons que  $\tau_r$  n'a absolument rien à voir avec le temps "de vie" des porteurs (temps entre création et recombinaison de porteurs) qui est en général beaucoup plus long. La vitesse thermique des porteurs, v<sub>th</sub>, s'exprime en fonction de l'énergie cinétique et de leur masse effective, m<sup>\*</sup>, qui reste de l'ordre de celle de l'électron dans le vide (9,1  $10^{-31}$  kg).

$$E_{cin} = \frac{1}{2}m^* v_{th}^2 = \frac{3}{2}kT$$
 (VI.1)

A 300 K la vitesse thermique est de l'ordre de  $10^5$  ms<sup>-1</sup>. La distance que parcourt un porteur entre deux chocs s'appelle le "libre parcours moyen",  $\lambda$ , et vaut simplement :

$$\lambda = v_{th} \tau_r \tag{VI.2}$$

qui à 300 K est d'environ 100 Å = 10 nm.

#### VI.1. Mobilité des porteurs libres

Lorsqu'un champ électrique  $\vec{\xi}$  est appliqué à un semi-conducteur, chaque porteur subit une force électrostatique  $\vec{F} = \pm q \vec{\xi}$  (+ pour le trous et - pour les électrons) et une force de frottement de type visqueux  $(-f_r \vec{v}_d)$  qui décrit l'effet des collisions. Son accélération  $\vec{\gamma}$  s'écrit (force = masse × accélération) :

$$\vec{\gamma} = \frac{d\vec{v}_d}{dt} = \pm \frac{q}{m^*} \vec{\xi} - \frac{f_r}{m^*} \vec{v}_d = \pm \frac{q}{m^*} \vec{\xi} - \frac{\vec{v}_d}{\tau_r}$$
(VI.3)

où m<sup>\*</sup> est la masse du porteur,  $\vec{v}_d$  sa vitesse d'entraînement (ou "de dérive") et  $f_r = m^*/\tau_r$  traduit les frottements de type visqueux.

En régime permanent  $\vec{\gamma} = 0$  d'où :

$$\vec{\mathbf{v}}_{d} = \pm \frac{q \tau_{\mathbf{r}}}{m *} \vec{\xi} = \mu \vec{\xi}$$
(VI.4)

ce qui permet d'exprimer la vitesse d'entraînement des électrons :

$$\vec{\mathbf{v}}_{dn} = -\frac{q\boldsymbol{\tau}_r}{m_n}\vec{\boldsymbol{\xi}} = \mu_n\vec{\boldsymbol{\xi}} \tag{VI.5}$$

et celle des trous :

$$\vec{\mathbf{v}}_{dp} = \frac{q\tau_r}{m_p}\vec{\xi} = \mu_p\vec{\xi} \tag{VI.6}$$

La mobilité  $\mu$  des porteurs est définie comme le coefficient de proportionnalité entre la vitesse et le champ électrique, ce qui donne pour les électrons et les trous :

$$\mu_n = -\frac{q\tau_r}{m_n} < 0 \tag{VI.7}$$

$$\mu_p = \frac{q\tau_r}{m_p} > 0 \tag{VI.8}$$

On obtient une mobilité négative pour les électrons. De nombreux ouvrages préfèrent considérer la mobilité en valeur absolue et écrivent donc  $\vec{v}_{dn} = -|\mu_n|\vec{\xi}$ .

En général trois mécanismes influencent la mobilité :

- Les collisions coulombiennes : les impuretés ionisées et d'une manière générale tous les centres chargés gênent le parcours des porteurs.
- Les collisions avec le réseau : les atomes du réseau cristallin qui vibrent autour de leur position moyenne (phonons) sont des obstacles pour les **porteurs**
- Les collisions sur la rugosité de surface : Les dimensions d'un composant à semiconducteur n'étant pas infinies, les porteurs "heurtent" parfois la surface et sont d'autant plus gênés dans leur mouvement que cette surface est de mauvaise qualité.

L'étude du processus résultant de l'existence simultanée de processus poissonniens <u>indépendants</u> conduit à la règle "de Matthiessen" qui stipule que les phénomènes influençant la mobilité doivent être sommés par l'inverse de leurs temps de relaxation, c'est-à-dire l'inverse des mobilités :



**Figure VI.1.** Evolution de la mobilité **a.** en fonction de la température **b.** en fonction de la densité en impuretés. **c.** Evolution de la vitesse des porteurs avec le champ électrique appliqué.

La température influence la mobilité au travers de  $\tau_r$ , à commencer par les chocs avec le réseau du semi-conducteur (phonons). Quand la température augmente la mobilité
correspondante diminue ce qui implique, a priori, une dépendance en  $T^{\alpha}$  ( $\alpha > 0$ ) avec théoriquement  $\alpha = 3/2$ . Les chocs sur les impuretés sont tels qu'une augmentation de température entraîne une augmentation de mobilité. Cette dépendance est de la forme  $T^{\beta}/N_{imp}$ ( $\beta > 0$ ) où  $N_{imp}$  (=  $N_{A^{*}} + N_{D^{+}}$ ) représente la densité en impuretés. Théoriquement  $\beta$  est trouvé égal à 3/2. La figure (VI.1.a) illustre ces influences de la température sur la mobilité.

Comme l'indique la figure (VI.1.b), une augmentation du dopage amène à une diminution de la mobilité.

La mobilité des porteurs est constante tant que le champ électrique est faible, ce qui signifie que la vitesse des électrons et des trous reste proportionnelle au champ électrique, mais cette proportionnalité disparaît lorsque le champ électrique devient trop important. Les porteurs acquièrent une certaine énergie cinétique qui augmente avec le champ électrique et qu'ils cèdent au réseau lors des chocs. Pour les forts champs électriques l'énergie à céder devient trop importante et les porteurs en conservent une partie après les chocs ; c'est ce que l'on appelle phénomène de "porteurs chauds" car alors les porteurs ne sont plus en équilibre thermique avec le réseau. Ainsi la vitesse ne reste pas proportionnelle au champ électrique et la mobilité devient une fonction de la température du réseau ( $T_{réseau}$ ) et de celle des porteurs ( $T_n$  ou  $T_p$ ). On obtient pour les électrons :

$$\mu_n = \mu_{n0} \sqrt{\frac{T_{\text{réseau}}}{T_n}}$$
(VI.10)

les indices "n" se changeant en "p" pour les trous ; cette relation montre que la mobilité diminue lorsque la température des porteurs augmente.  $\mu_{n0}$  (respectivement  $\mu_{p0}$ ) représente la mobilité des électrons (respectivement trous) à faible champ électrique.

Plutôt que l'équation (VI.10), on préfère utiliser les relations empiriques de la forme :

$$\mu_n = \frac{\mu_{n0}}{1 + f(\vec{\xi})} \tag{VI.11}$$

comme par exemple  $\mu_n = \mu_{n0}/[1+(E/E_C)^{\alpha}]^{1/\alpha}$  avec  $\alpha = 1$  ou 2, E<sub>C</sub> représentant un champ "critique".

La vitesse de saturation des porteurs est voisine de la vitesse thermique  $v_{th}$ . Pour le GaAs (et d'autre composés III-V) on observe une "survitesse". En effet, comme montré à la figure (VI.2), l'augmentation du champ électrique peut faire passer les électrons de la vallée 1 à la vallée 2 où la masse effective  $m_n$  associée à la relation de dispersion est plus grande (liée à la courbure) donc la mobilité est plus faible. Cette propriété est aussi à l'origine de "l'effet Gunn" (mobilité différentielle négative) utilisée pour réaliser des oscillateurs en hautes fréquences.



**Figure VI.2.** Sous fort champ électrique, les électrons du GaAs vont passer dans la deuxième vallée où leur masse est plus grande donc leur mobilité plus faible.

SC	$\mathbf{E}_{\mathbf{G}}$	$ \mu_n $	$\mu_{p}$	٤r	SC	$\mathbf{E}_{\mathrm{G}}$	$ \mu_n $	$\mu_p$	٤r
Si	1.12	1400	500	11.9	InAs	0.36	33000	460	14.6
Ge	0.7	3900	1900	16	InSb	0.18	78000	750	17.7
GaAs	1.42	8500	400	13	GaSb	0.72	5000	850	15.7
InP	1.35	5000	150	12.4	CdS	2.42	340	50	5.4
AlAs	2.16	1200	400	10.1	CdTe	1.56	1050	100	10.2
GaP	2.26	300	100	11	${ m SiO}_2$	9	isolant		3.9

Le tableau (VI.1) donne des valeurs de mobilités des électrons et des trous pour plusieurs semi-conducteurs

**Tableau VI.1.** Mobilité des électrons, des trous et permittivité pour quelques semiconducteurs.  $E_G$  (eV),  $\mu_n$  et  $\mu_p$  (cm<sup>2</sup>V<sup>-1</sup>s<sup>-1</sup>).

#### VI.2. Conduction et conductivité

La densité de courant  $\overline{j}$  (Am<sup>-2</sup>) est définie comme le flux de charges qui passe par unité de surface. Elle est donc égale à la vitesse des charges multipliées par la concentration de charges (Cm<sup>-3</sup>). Pour les électrons cela donne :

$$\vec{j}_n = -qn\vec{v}_{dn}$$
 (VI.12)

la charge d'un électron étant – q et celle d'un trou + q.

En remplaçant la vitesse de l'électron par son expression en fonction de la mobilité et du champ on trouve l'expression de la densité de courant des électrons. En suivant le même raisonnement on obtient aussi la densité de courant des trous :

$$\begin{cases} \vec{j}_n = -qn\mu_n \vec{\xi} = qn|\mu_n|\vec{\xi} = \sigma_n \vec{\xi} \\ \vec{j}_p = qn\mu_p \vec{\xi} = \sigma_p \vec{\xi} \end{cases}$$
(VI.13)

La conductivité ( $\sigma_n$  pour les électrons) est définie comme le coefficient de proportionnalité entre la densité de courant et le champ électrique :

$$\sigma_{n} = qn|\mu_{n}| = \frac{q^{2}n\tau_{r}}{m_{n}} > 0 \qquad (VI.14)$$

De même pour les trous :

$$\sigma_{\rm p} = qp\mu_{\rm p} = \frac{q^2 p \tau_{\rm r}}{m_{\rm p}} > 0 \tag{VI.15}$$

Dans le cas d'une conduction par les électrons et les trous la densité de courant totale s'écrit :

$$\vec{j}_{tot} = \vec{j}_n + \vec{j}_p = (\sigma_n + \sigma_p)\vec{\xi} = \sigma_{tot}\vec{\xi}$$
 (VI.16)

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

$$j_{tot} = \sigma_{tot} \frac{V}{L}$$
(VI.17)

et le courant I s'écrit (il est égal à la densité de courant multipliée par la section S dans laquelle elle passe) :

$$I = S\sigma_{tot} \frac{V}{L} = \frac{1}{R}V$$
(VI.18)

La loi d'Ohm permet d'identifier la résistance R de l'échantillon :

$$R = \frac{1}{\sigma_{tot}} \frac{L}{S} = \frac{1}{\left(qn|\mu_n| + qp\mu_p\right)} \frac{L}{S}$$
(VI.19)



Figure V	VI.3.	Applicat	ion d'ı	ine différen	ce de
potentiel	aux	bornes	d'un	semi-condi	ucteur
homogène	et dia	gramme o	de band	les correspor	ıdant.
Le champ	électri	aue. en to	ut poin	t x. vaut :	

$$\xi_x = -dV/dx = constante = -V/L$$

La figure (VI.3) illustre le cas d'un semi-conducteur aux bornes duquel est appliquée une tension V. Le matériau est hors équilibre thermodynamique ce qui se traduit par un flux de porteurs. Si on admet que la perturbation de l'équilibre n'est pas trop importante ("quasi-équilibre"), on peut utiliser la statistique de Fermi-Dirac et donc l'équation (IV.13) ; on exprime donc la densité d'électrons lorsqu'on applique un champ électrique pas trop intense :

$$\mathbf{n}(\vec{r}) = \mathbf{N}_{\mathrm{C}} \exp\left(-\frac{\mathbf{E}_{\mathrm{C}}(\vec{r}) - \mathbf{E}_{\mathrm{F}}(\vec{r})}{\mathbf{k}\mathrm{T}}\right) = \operatorname{cons} \tan t \mathbf{e} = \mathbf{n}_{0}$$
(VI.20)

 $E_C(\vec{r}) - E_C = -qV(\vec{r})$  représente la différence d'énergie potentielle dans le semi-conducteur entre la masse et un point  $\vec{r}$ .

#### VI.3. Diffusion des porteurs

L'apparition d'un gradient de porteurs dans un matériau (dans le cas d'un semi-conducteur non homogène ou lors d'une excitation locale...) engendre un flux de ces porteurs dans le sens inverse du gradient. En effet, dans un endroit où la concentration en porteurs est très forte, l'interaction entre les porteurs est très grande et la densité d'énergie est plus grande dans cet endroit que là où la concentration en porteurs est plus faible. Pour établir l'équilibre, les porteurs vont "diffuser". Si l'on prend le cas des électrons (figure (VI.4) à une dimension), le flux de porteurs (m<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup>)est donné par la loi de Fick :

$$\begin{cases} \overrightarrow{\text{flux}}_{n} = -D_{n} \overrightarrow{\text{grad}}(n) \\ \overrightarrow{\text{flux}}_{p} = -D_{p} \overrightarrow{\text{grad}}(p) \end{cases}$$
(VI.21)

où  $D_{n,p}$  (m<sup>2</sup>s<sup>-1</sup>) est le coefficient de diffusion des électrons (des trous). Le signe – des équations (VI.21) vient du sens du flux qui est opposé à celui du gradient de concentration.



**Figure VI.4.** Le gradient de concentration en électrons engendre une diffusion de ces électrons vers la zone la moins concentrée.

Le courant de diffusion s'écrit à partir des équations (VI.21) :

$$\begin{cases} \vec{j}_n = (-q) \overrightarrow{flux}_{n_n} = q D_n \overrightarrow{grad}(n) \\ \vec{j}_p = q \overrightarrow{flux}_{n_p} = -q D_p \overrightarrow{grad}(p) \end{cases}$$
(VI.22)

Si un champ électrique est aussi appliqué au semi-conducteur, on peut écrire la densité de courant des électrons en prenant en compte la diffusion (équation (VI.22)) et la conduction électrique (équation (VI.13)). Puis avec le même raisonnement, on peut écrire la densité de courant des trous :

$$\begin{cases} \vec{j}_{n} = \vec{j}_{nconduction} + \vec{j}_{ndiffusion} = q \left( n |\mu_{n}| \vec{\xi} + D_{n} \operatorname{grad}(n) \right) \\ \vec{j}_{p} = \vec{j}_{pconduction} + \vec{j}_{pdiffusion} = q \left( p \mu_{p} \vec{\xi} - D_{p} \operatorname{grad}(p) \right) \end{cases}$$
(VI.23)

Les flux de porteurs ont pour expression :

$$\begin{cases} \overrightarrow{\text{flux}}_{n} = \overrightarrow{\text{flux}}_{n\text{conduction}} + \overrightarrow{\text{flux}}_{n\text{diffusion}} = -n|\mu_{n}|\vec{\xi} - D_{n} \operatorname{grad}(n) = n\mu_{n}\vec{\xi} - D_{n} \operatorname{grad}(n) \\ \overrightarrow{\text{flux}}_{p} = \overrightarrow{\text{flux}}_{p\text{conduction}} + \overrightarrow{\text{flux}}_{p\text{diffusion}} = p\mu_{p}\vec{\xi} - D_{p} \operatorname{grad}(p) \end{cases}$$

$$(VI.24)$$

Pour un semi-conducteur non dégénéré, et en l'absence de porteurs chauds, le coefficient de diffusion des électrons est donné par la relation d'Einstein,  $D = \mu kT/q$ , qui peut être démontrée, par exemple, en considérant un semi-conducteur non homogène et à l'équilibre thermodynamique (ce qui implique un niveau de Fermi  $E_F$  constant dans le matériau et donc un courant nul) : ainsi, dans le cas des électrons, l'équation (VI.23) se réécrit :

$$\vec{j}_n = \vec{0} = q \left( n(\vec{r}) |\mu_n| \vec{\xi} + D_n \operatorname{grad}(n(\vec{r})) \right)$$
 (VI.25)

L'équation (V.7) permet d'écrire  $\overrightarrow{\text{grad}}(n(\vec{r})) = (q/kT)n(\vec{r})\overrightarrow{\text{grad}}(V(\vec{r}))$  et, en remplaçant le champ électrique par  $-\overrightarrow{\text{grad}}(V(\vec{r}))$ , on trouve pour l'équation (VI.25) :

$$\mathbf{n}(\vec{\mathbf{r}})|\boldsymbol{\mu}_{n}| \overrightarrow{\operatorname{grad}}(\mathbf{V}(\vec{\mathbf{r}})) = \mathbf{D}_{n} \frac{\mathbf{q}}{\mathbf{k}T} \mathbf{n}(\vec{\mathbf{r}}) \overrightarrow{\operatorname{grad}}(\mathbf{V}(\vec{\mathbf{r}}))$$
(VI.26)

qui permet d'exprimer  $D_n$  :

$$D_n = \left| \mu_n \right| \frac{kT}{q} > 0 \tag{VI.27}$$

De la même façon, on obtient l'expression du coefficient de diffusion des trous :

$$D_{p} = \mu_{p} \frac{kT}{q} > 0 \tag{VI.28}$$

#### VI.4. Courant de déplacement

En régime variable, il existe un courant "de déplacement" donné par :

$$\vec{j}_{depl} = \frac{\partial D}{\partial t}$$
 (VI.29)

où  $\vec{D} = \epsilon_{SC} \vec{\xi} = \epsilon_0 \epsilon_r \vec{\xi}$  est le vecteur déplacement électrique. En régime alternatif, si on écrit  $\vec{\xi} = \vec{\xi}_0 \exp(i\omega t)$ , le courant de déplacement sera :

$$\vec{j}_{dépl} = i\omega \varepsilon_{SC} \vec{\xi}$$
(VI.30)

Un calcul rapide d'ordre de grandeur montre que ce courant n'aura une amplitude appréciable que pour des fréquences de l'ordre du GHz. Ainsi, le courant de déplacement sera en général considéré comme négligeable, sauf lors de l'étude des régimes variables de dispositifs en hautes fréquences.

## VI.5. Transport de charges en présence de champs électrique et magnétique. Effet Hall - Magnétorésistance

La figure (VI.5) présente un semi-conducteur auquel est appliqué un champ électrique selon l'axe x. Les porteurs majoritaires se déplacent alors avec une vitesse de dérive  $\vec{v}$  dans le même sens que  $\vec{\xi}_x$  si l'on considère un semi-conducteur de type p et dans le sens contraire de  $\vec{\xi}_x$  si le SC est de type n. Le champ magnétique  $\vec{B}_z$  crée une force de Laplace (Lorentz)  $\vec{F}_L$  dans la direction des y négatifs pour les électrons et les trous. L'équilibre sera atteint grâce à l'apparition d'un champ électrique transversal  $E_y$  (champ Hall).



**Figure VI.5.** Semi-conducteur subissant des champs électrique et magnétique mettant en évidence l'effet Hall.

La masse multipliée par l'accélération étant égale à la somme des forces, on écrit pour les électrons (indice n, charge -q) et les trous (indice p, charge +q) :

$$m_{n,p} \frac{d\vec{v}_{dn,p}}{dt} = \sum Forces = -f_{rn,p}\vec{v}_{dn,p} \mp q\vec{\xi} \mp q\vec{v}_{dn,p} \wedge \vec{B}$$
(VI.31)

$$\tau_{\mathbf{r}} \mathbf{m}_{\mathbf{n},\mathbf{p}} \frac{\mathrm{d}\vec{\mathbf{v}}_{\mathrm{dn},\mathbf{p}}}{\mathrm{d}\mathbf{t}} + \mathbf{m}_{\mathbf{n},\mathbf{p}} \vec{\mathbf{v}}_{\mathrm{dn},\mathbf{p}} = \mp \tau_{\mathbf{r}} q \left( \vec{\xi} + \vec{\mathbf{v}}_{\mathrm{dn},\mathbf{p}} \wedge \vec{\mathbf{B}} \right)$$
(VI.32)

le signe – correspond aux électrons et le signe + aux trous avec fr =  $m/\tau_r$ . L'équation (VI.32) devient :

$$\tau_{\mathbf{r}} \frac{d\vec{\mathbf{v}}_{dn,p}}{dt} + \vec{\mathbf{v}}_{dn,p} = \mp \frac{q\tau_{\mathbf{r}}}{m_{n,p}} \left( \vec{\xi} + \vec{\mathbf{v}}_{dn,p} \wedge \vec{B} \right) = \mu_{n,p} \left( \vec{\xi} + \vec{\mathbf{v}}_{dn,p} \wedge \vec{B} \right)$$
(VI.33)

Pour un ensemble de porteurs donnant un courant de conduction  $\vec{i} = \sigma \vec{\xi}$ , l'équation (VI.12) permet d'écrire, pour les porteurs majoritaires (électrons ou trous) :

$$\tau_{\rm r} \frac{{\rm d}\vec{j}}{{\rm d}t} + \vec{j} = \sigma \vec{\xi} + \mu \vec{j} \wedge \vec{\rm B}$$
(VI.34)

En régime permanent (la dérivée du courant par rapport au temps étant nulle), la loi d'Ohm généralisée s'écrit alors :

$$\vec{j} = \sigma \vec{\xi} + \mu \vec{j} \wedge \vec{B}$$
 (VI.35)

A partir de l'équation (VI.35), on exprime le champ électrique :

$$\vec{\xi} = \frac{\vec{j}}{\sigma} - \frac{\mu}{\sigma}\vec{j} \wedge \vec{B} = \frac{\vec{j}}{\sigma} - R_H\vec{j} \wedge \vec{B}$$
(VI.36)

 $R_H$  est appelé "coefficient de Hall"; il est de signe positif (1/qp) pour un semi-conducteur de type p, et négatif (-1/qn) pour un SC de type n.

Une analyse plus complète montrerait qu'on doit également tenir compte, pour chaque type de porteurs, de la dispersion des vitesses (distribution de Maxwell) en fonction de l'énergie des porteurs ; le temps de relaxation  $\tau_r$  dépend alors de cette énergie et la mobilité doit être définie comme une moyenne par rapport à l'énergie. Il en résulte que, dans les équations (VI.34) et (VI.35), la mobilité  $\mu$  doit être remplacée par une mobilité "de Hall"  $\mu_H = r\mu$ , où r est un coefficient qui dépend du type de collisions que subissent les porteurs (r =  $3\pi/8$  pour les collisions sur le réseau), et que R<sub>H</sub> =  $\mu_H/\sigma$  = r/qp (SC type *p*) et -r/qn (SC type *n*). Si on considère que le courant selon les axes y et z est nul  $(j_y = 0, j_z = 0)$  il reste selon les trois directions, en régime permanent :

$$\begin{cases} \xi_{x} = \frac{j_{x}}{\sigma} & \text{(loi d'Ohm classique)} \\ \xi_{y} = R_{H}j_{x}B_{z} = \mu_{H}B_{z}\xi_{x} = \xi_{H} & \text{(champ Hall, créant la tension de Hall)} \\ \xi_{z} = 0 \end{cases}$$
(VI.37)

Le champ Hall  $\xi_y$  s'oppose au mouvement transversal des porteurs et sa mesure ou plutôt son signe permet de déterminer le type *n* ou *p* du semi-conducteur ( $\xi_y < 0$  pour un type *n*,  $\xi_y > 0$  pour un type *p*).

L'effet de magnétorésistance est un effet du second ordre en  $\mu B$  (donc en  $\mu^2 B^2$ ) qui correspond à une augmentation de résistance [= diminution de conductivité  $\sigma_B = \sigma_0/(1+g\mu^2 B^2)$ ] en présence d'une induction magnétique. Il peut être interprété comme un second effet Hall sur des flux transversaux de porteurs (le champ Hall n'équilibre que le mouvement "moyen" des porteurs majoritaires), et sera donc renforcé lorsque l'on court-circuite l'effet Hall.

Des "effets géométriques" peuvent, en particulier, réaliser un court-circuit plus ou moins complet de l'effet Hall, comme c'est le cas dans la configuration appelée "disque de Corbino" (les contacts d'amenée et de sortie du courant sont sur la périphérie et au centre d'un disque) qui présente aussi une magnétorésistance maximale.

Pour l'utilisation comme capteur de champ magnétique, il est clair qu'aussi bien l'effet Hall que l'effet magnétorésistance seront d'autant plus important que l'on utilise un matériau où la mobilité des porteurs majoritaires est élevée (ex. : InSb type n).

# Chapitre VII. Perturbations fortes de l'équilibre : création et disparition de porteurs

## VII.1. Création de porteurs

La création d'un porteur libre correspond à une transition soit entre bandes (BV - BC) de ce porteur soit entre un niveau d'énergie et une bande :

- Transition d'un électron de la bande de valence vers la bande de conduction qui correspond à la création d'une paire électron-trou.
- Transition d'un électron d'un niveau E<sub>D</sub> (situé dans la bande interdite) vers la bande de conduction. Il reste une charge fixe positive (atome ionisé) et un électron dans BC.
- Transition d'un électron de la bande de valence vers un niveau E<sub>A</sub> du gap. Il reste une charge négative fixe et un trou (dans BV).

L'énergie nécessaire pour rendre possible de telles transitions est fournie soit par des photons (lumière) soit par des particules énergétiques (rayonnements ou porteurs). On introduit un taux de génération (ou de créations) de porteurs  $G_n$  (m<sup>3</sup>s<sup>-1</sup>) pour les électrons et  $G_p$  pour les trous. Quand les transitions se font "bande à bande" ces deux taux sont égaux (création "par paires", qui seules seront considérées dans la suite).

#### VII.1.1. Création par énergie lumineuse (par photons)

Un photon de fréquence v ayant une énergie hv au minimum égale à  $E_G$ , figure (VII.1), peut en cédant cette énergie faire passer un électron de la bande de valence vers la bande de conduction :

$$hv = h\frac{c}{\lambda} \ge E_G$$
 (VII.1)

où  $\lambda$  est la longueur d'onde du photon et c la vitesse de la lumière. La longueur d'onde maximale susceptible de contribuer à la création de porteurs s'obtient avec l'équation (VII.1) :

$$\lambda \le \frac{hc}{E_G} \approx \frac{1.24}{E_G}$$
(VII.2)

où  $\lambda$  est donné en  $\mu$ m et E<sub>G</sub> en eV.



**Figure VII.1.** Création d'une paire électrontrou par photon Ainsi pour détecter les infrarouges il faudra utiliser des semi-conducteurs à faible gap (faible E<sub>G</sub>) tels que InSb ou CdHgTe. La figure (VII.2) indique une partie des semi-conducteurs pouvant être utilisés selon la longueur d'onde à détecter.



Figure VII.2. Diagramme des longueurs d'onde absorbées par les semi-conducteurs.

L'absorption de l'onde incidente dans le semi-conducteur se fait selon la loi de BEER-LAMBERT :

$$I(x) = I_0 \exp(-\alpha x) \qquad \Leftrightarrow \qquad \Phi(x) = \Phi_0 \exp(-\alpha x) \tag{VII.3}$$

où I(x) est l'intensité lumineuse (et  $\Phi(x)$  le flux de photons) à la distance x de la surface du matériau, I<sub>0</sub> et  $\Phi_0$  sont l'intensité et le flux incidents (en x = 0) et  $\alpha$  le coefficient d'absorption (m<sup>-1</sup>). 1/ $\alpha$  est la longueur moyenne de pénétration et, si l'énergie des photons est supérieure à E<sub>G</sub>,  $\alpha$  est de l'ordre de 10<sup>5</sup> à 10<sup>8</sup> m<sup>-1</sup>(1/ $\alpha$  de 10 à 0.01 µm).

<u>**Remarque**</u> : α peut être défini par :

Probabilité (absorption d'un photon sur la distance dx) =  $\alpha dx = (-d\Phi)/\Phi$ 

Le nombre de porteurs créés sur une distance dx s'écrit (en supposant que chaque photon absorbé crée une paire ; on dit "rendement quantique" supposé égal à 1) :

$$G_{n,p}(x)dx = \Phi(x) - \Phi(x + dx) = \Phi_0 [exp(-\alpha x) - exp(-\alpha(x + dx))]$$
  
=  $\Phi_0 [exp(-\alpha x) - (1 - \alpha dx)exp(-\alpha x)]$  (VII.4)  
=  $\Phi_0 \alpha exp(-\alpha x) = \alpha \Phi(x)dx$ 

d'où l'expression du taux de création de porteurs :

$$G_{n,p}(x) = \Phi_0 \alpha \exp(-\alpha x) = \alpha \Phi(x)$$
(VII.5)

#### VII.1.2. Création par des particules (ou radiations) ionisantes

Le rayonnement ici considéré (rayons X ou  $\gamma$ ) est très énergétique : de quelques keV à 10 MeV. Une partie de l'énergie cédée en pénétrant dans le semi-conducteur contribue à la création de porteurs (qui peuvent avoir une certaine énergie cinétique). Ainsi l'énergie nécessaire à la création d'une paire électron-trou notée  $E_{paire}$ , est supérieure à E<sub>G</sub>. Par exemple pour le Silicium, dont le gap vaut 1,12 eV, il faut un énergie  $E_{paire}$  égale à 3,7 eV. Le nombre de porteurs crées sur une distance dx est :

$$G_{n,p}dx = \Phi \frac{dE}{E_{paire}} \qquad \Leftrightarrow \qquad G_{n,p} = \Phi \frac{1}{E_{paire}} \left( \frac{dE}{dx} \right)$$
(VII.6)

où  $\Phi$  est le flux du rayonnement et dE l'énergie qu'il perd sur dx dans le semi-conducteur considéré (dE/dx est ainsi une caractéristique du matériau).

En mesurant le nombre de paires créées, on remonte au flux du rayonnement incident.

#### VII.1.3 Création par porteurs "chauds" (champ électrique intense)

Sous un champ électrique suffisamment fort (supérieur à  $10^5$  V/cm), les porteurs ainsi accélérés peuvent céder leur énergie à d'autres charges (qui deviennent libres) lors d'une collision : c'est le phénomène "d'ionisation par impact" qui est à l'origine des effets d'avalanche. Pour cela les porteurs doivent avoir une énergie minimale ("énergie de seuil" supérieure à l'énergie du gap), qui dans le cas du Silicium est de 1,8 eV pour les électrons et de 2,4 eV pour les trous.

Ce phénomène est caractérisé par un "coefficient d'ionisation", noté  $\alpha_n$  (m<sup>-1</sup>) pour les électrons et  $\alpha_p$  pour les trous, qui est le nombre de paires créées par un porteur sur un mètre.  $\alpha_n$  et  $\alpha_p$ sont fonctions de l'intensité du champ électrique.

#### VII.1.4. Création par injection de porteurs

Dans certains composants semi-conducteurs (diode n<sup>+</sup>p, p<sup>+</sup>n, contact métal-SC, ... ), nous verrons qu'une partie de la structure est susceptible d'injecter des électrons (ou des trous) dans l'autre. Les concentrations de porteurs obtenues dans la région où se produit l'injection peuvent parfois être très supérieures à celles existant à l'équilibre.

#### VII.2. Quasi-niveaux de Fermi

Les quasi-niveaux de Fermi (ou pseudo-niveaux de Fermi) permettent d'écrire les densités de porteurs **hors équilibre** avec le formalisme utilisé à l'équilibre thermodynamique.  $E_F$  de l'équilibre doit être remplacé, hors équilibre, par  $E_{Fn}$  pour les électrons et  $E_{Fp}$  pour les trous.

La probabilité d'occupation d'un niveau d'énergie E par un électron pourra donc s'écrire, même en dehors de l'équilibre thermodynamique :

$$f_{n}(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_{Fn}}{kT}\right)}$$
(VII.7)

et la probabilité d'occupation d'un niveau d'énergie E par un trou s'écrira :

$$f_{p}(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_{Fp} - E}{kT}\right)}$$
(VII.8)

Parallèlement aux relations donnant les concentrations en électrons (équation (IV.19)) et en trous (équation (IV.20)) à l'équilibre thermodynamique, on exprime ces concentrations hors équilibre par :

$$n = n_{i} \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_{Fi}}{kT}\right)$$
(VII.9)

$$p = n_{i} \exp\left(-\frac{E_{Fp} - E_{Fi}}{kT}\right)$$
(VII.10)

Le produit de ces deux concentrations n'est plus égal à  $n_i^2$  (comme à l'équilibre), mais à :

$$np = n_{i}^{2} \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_{Fp}}{kT}\right)$$
(VII.11)

**Exemple d'application :** soit un barreau de Silicium (n<sub>i</sub> =  $1,5 \times 10^{10}$  cm<sup>-3</sup> à 300 K) dopé avec des impuretés donatrices afin d'obtenir n<sub>0</sub> =  $10^{14}$  cm<sup>-3</sup> (p<sub>0</sub> =  $n_i^2/n_0 = 2,25 \times 10^6$  cm<sup>-3</sup>). On crée des porteurs par paires avec une concentration  $\delta n = \delta p = 2 \times 10^{13}$  cm<sup>-3</sup>. L'équation (IV.19) permet de déterminer la position du niveau de Fermi à l'équilibre par rapport au niveau de Fermi intrinsèque (qui est à peu près au milieu du gap).

$$E_{\rm F} - E_{\rm Fi} = k \ln \left(\frac{n_0}{n_i}\right) = 1,38 \times 10^{-23} \times 300 \times \ln \left(\frac{10^{14}}{1,5 \times 10^{10}}\right) = 4,6 \times 10^{-20} \text{ J} = 0,228 \text{ eV}$$
(VII.12)

Les concentrations en porteurs hors équilibre sont :

$$n = n_0 + \delta n = 1.2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3} (\approx n_0)$$
(VII.13)

$$p = p_0 + \delta p \approx \delta p = 0.2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$$
 (VII.14)

Avec les équations (VII.9) et (VII.10), on peut calculer l'écart entre les quasi-niveaux de Fermi et le niveau de Fermi intrinsèque :

$$E_{Fn} - E_{Fi} = kT \ln\left(\frac{n}{n_i}\right) = 1,38 \times 10^{-23} \times 300 \times \ln\left(\frac{1,2 \times 10^{14}}{1,5 \times 10^{10}}\right) = 0,233 \text{ eV}$$
(VII.15)

$$E_{Fp} - E_{Fi} = -kT \ln\left(\frac{p}{n_i}\right) = -1.38 \times 10^{-23} \times 300 \times \ln\left(\frac{0.2 \times 10^{14}}{1.5 \times 10^{10}}\right) = -0.186 \text{ eV}$$
(VII.16)



**Figure VII.3.** Diagramme de bandes du Silicium hors équilibre faisant apparaître les quasi-niveaux de Fermi.

L'utilisation des quasi-niveaux de Fermi permet d'écrire assez simplement l'expression du courant total (conduction + diffusion). En effet, le courant total d'électrons ou de trous vaut :

$$\begin{cases} \vec{i}_{n} = q \left( n |\mu_{n}| \vec{E} + D_{n} \operatorname{grad}(n) \right) = q n |\mu_{n}| \left( \vec{E} - \frac{kT}{q} \operatorname{grad}(n) \right) \\ \vec{i}_{p} = q p \mu_{p} \left( \vec{E} - \frac{kT}{q} \operatorname{grad}(p) \right) \end{cases}$$
(VII.17)

Avec les équations (VII.9) et (VII.10), on obtient les expressions des gradients de concentration en fonction des quasi-niveaux de Fermi :

$$\begin{aligned} \left( \overrightarrow{\text{grad}}(n) &= \overrightarrow{\text{grad}}\left(n_{i} \exp\left(\frac{\mathbf{E}_{Fn} - \mathbf{E}_{Fi}}{kT}\right) \right) = \frac{n}{kT} \left( \overrightarrow{\text{grad}} \mathbf{E}_{Fn} - \overrightarrow{\text{grad}} \mathbf{E}_{Fi} \right) \\ \left( \overrightarrow{\text{grad}}(p) &= \overrightarrow{\text{grad}}\left(n_{i} \exp\left(-\frac{\mathbf{E}_{Fp} - \mathbf{E}_{Fi}}{kT}\right) \right) = -\frac{p}{kT} \left( \overrightarrow{\text{grad}} \mathbf{E}_{Fp} - \overrightarrow{\text{grad}} \mathbf{E}_{Fi} \right) \end{aligned}$$
(VII.18)

Or  $\operatorname{grad}(E_{\mathrm{Fi}}) = \operatorname{grad}(E_{\mathrm{C}}) = \operatorname{grad}(E_{\mathrm{V}}) = \operatorname{grad}(-q_{\mathrm{V}}) = -q \operatorname{grad}(V) = q \vec{\xi}$ . Le courant total d'électrons (ou de trous) s'écrit alors :

$$\begin{cases} \vec{j}_{n} = n|\mu_{n}| \operatorname{grad}(E_{Fn}) \\ \vec{j}_{p} = p\mu_{p} \operatorname{grad}(E_{Fp}) \end{cases}$$
(VII.19)

#### VII.3. Recombinaison (disparition) et durée de vie des porteurs libres

Le processus de génération de porteurs est équilibré par un processus de disparition appelé "recombinaison". La recombinaison peut être qualifiée de :

#### Par rapport au mécanisme de disparition :

- Directe (bande à bande) : l'électron passe directement de la BC à la BV
- Indirecte : l'électron passe de la BC à un niveau d'énergie d'une impureté agissant comme "centre de recombinaison" et situé dans la bande interdite, puis il sera réémis vers la BV. Cette étape peut aussi être décrit, de façon équivalente, comme la capture par le centre recombinant d'un trou de la BV

#### Par rapport aux échanges d'énergie :

- Radiative : l'énergie (de recombinaison) est cédée sous forme lumineuse (photon)
- Non radiative : l'énergie est cédée sous forme de phonons (vibrations du réseau) ou à un autre électron libre ("recombinaison Auger").

Comme pour la génération, on caractérise le processus de recombinaison par un "taux de recombinaison"  $R_n$  (m<sup>-3</sup>s<sup>-1</sup>) pour les électrons et  $R_p$  pour les trous. Si la variation de la concentration de porteurs est due uniquement à de la recombinaison, on aura :

$$R_{n,p} = -\frac{dn, p(t)}{dt}$$
(VII.20)

Si la variation de la concentration de porteurs par rapport à l'équilibre est  $\delta n = n - n_0$ , on peut dire au premier ordre que le taux de recombinaison est proportionnel au déséquilibre. Le coefficient de proportionnalité a comme dimension l'inverse d'un temps; le taux de recombinaison s'écrira donc :

$$R_n = \frac{\delta n}{\tau_n}$$
(VII.21)

où  $\tau_n$  est appelé "**durée de vie** des porteurs de type *n*".

D'un point de vue probabiliste, cette durée de vie  $\tau$  peut être définie par rapport à la densité  $\lambda$  du processus poissonnien décrivant la recombinaison :

Probabilité de recombinaison d'un électron pendant une durée dt =  $\lambda dt = dt/\tau$ 

 $\lambda = 1/\tau$  correspond donc au nombre moyen de recombinaisons par unité de temps, et la durée de vie  $\tau$  apparaît alors comme le temps moyen qu'un électron passe dans la bande de conduction avant de se recombiner.

La recombinaison dans le Silicium est indirecte et non radiative. Si le cristal est pur la durée de vie est de l'ordre de 1 ms mais elle peut descendre à  $10^{-9}$  s (1 ns) s'il y a des centres de recombinaison tels que l'or (Au) ou le platine (Pt).

Dans le GaAs, la recombinaison est directe et radiative avec une longueur d'onde de 0,9  $\mu$ m. Pour le GaP la recombinaison est indirecte et non radiative mais la présence d'impuretés peut la rendre radiative. Les longueurs d'ondes émises peuvent être dans la gamme du visible ; ce semiconducteur est utilisé pour la réalisation d'afficheurs (LED rouge ou verte). Dans le composé GaAs<sub>1-x</sub>P<sub>x</sub>, la recombinaison est directe et radiative tant que x < 0,45 ; l'émission a lieu dans le rouge mais peut être décalée en introduisant des impuretés ; ce matériau est aussi utilisé pour réaliser des diodes électroluminescentes et des diodes laser.

#### VII.3.1. Expression de la durée de vie (cas de recombinaison directe)

Il y a disparition simultanée de paires électron-trou et à tout instant, l'intensité de la recombinaison est proportionnelle au nombre n d'électrons dans la BC et au nombre p de trous dans la BV, donc au produit n×p. En tenant compte du taux de génération  $G_{th}$  de porteurs d'origine thermique, on peut écrire :

$$\frac{\delta n}{\tau_{n,p}} = R_{n,p} = -\frac{dn(t)}{dt} = c_R n(t)p(t) - G_{th}$$
(VII.22)

(où  $c_R$  peut être considéré comme un coefficient proportionnel à la probabilité de recombinaison bande à bande).

A l'équilibre thermodynamique,  $n(t) = n_0$ ,  $p(t) = p_0$  et  $\delta n = \delta p = 0$ , donc R = 0. On a donc  $G_{th} = c_R n_0 p_0 = c_R n_i^2$ , et donc :

$$R = \frac{\delta n}{\tau} = c_R \left( np - n_i^2 \right)$$
(VII.23)

On remarque donc que :

- Si np >  $n_i^2$  (porteurs en excès) : R > 0, et il y a recombinaison des porteurs en excès.
- Si np < ni<sup>2</sup> (défaut de porteurs : voir par exemple le d'une cas zone désertée) on a une recombinaison "négative", c'est-à-dire une création (par génération thermique) de porteurs.

Dans les deux cas, le semi-conducteur réagit pour provoquer un retour à l'équilibre.

Les porteurs étant recombinés (et créés) par paire, on a  $\delta n(t) = \delta p(t)$ . En remplaçant dans l'équation (VII.23) n par  $n_0 + \delta n$  et p par  $p_0 + \delta p$ , on obtient :

$$R = \frac{\delta n}{\tau} = c_R (n_0 + p_0 + \delta n) \delta n$$
(VII.24)

d'où, par identification, la valeur de  $\tau$ . On constate qu'a priori  $\tau$  dépend de  $\delta$ n et que la loi de recombinaison ne sera "linéaire" (c.à.d.  $\tau$  indépendant de l'excès de porteurs) que sous la condition dite de "*faible injection*" où  $\delta$ n << n<sub>0</sub> + p<sub>0</sub>  $\approx$  n<sub>0</sub> (SC type *n*) ou p<sub>0</sub> (SC type *p*).

#### VII.3.2. Durée de vie dans le cas d'une recombinaison indirecte

Dans ce cas une impureté (ou un défaut du réseau), situé à une énergie  $E_R$  dans la bande interdite agit comme "centre de recombinaison", c'est-à-dire comme "marche intermédiaire" ("relais") pour le passage d'un électron de BC vers BV.

Evidemment un tel centre n'est efficace vis à vis du processus de recombinaison que dans la mesure où, juste après avoir capté un électron de BC, il va capter un trou de BV (⇔ réémettre l'électron vers BV). Si l'électron est réémis vers BC, le centre sera dit "de piégeage" (ou piège, "trap" en anglais) et son rôle ne revient qu'à soustraire pendant un certain temps un électron à la bande de conduction (c.à.d. le "piéger").

Le calcul du taux de recombinaison (et donc de la durée de vie  $\tau$ ) associé à des centres de recombinaison est donné par le modèle de Shockley et Read, et tient compte, par exemple pour un centre recombinant à 2 états de charge possible (0 = neutre, et -, cas d'un centre accepteur), des 4 mécanismes possibles (cf. Fig. (VII.4))



**Figure VII.4.** Mécanismes de capture et d'émission de porteurs : (1) = capture d'un électron (de BC), (2) = émission d'un électron (vers BC), (3) = capture d'un trou, (4) = émission d'un trou, (1) + (3) = recombinaison (indirecte), (1) + (2) = piégeage d'électrons, (3) + (4) = piégeage de trous.

En régime <u>permanent</u>, on aura toujours (voir plus loin, équation (VIII.7))  $R_n = \delta n/\tau_n = R_p = \delta p/\tau_p = R$  et , si  $\delta n_R \ll \delta n$ ,  $\delta p$ , on aura  $\delta n \approx \delta p$ , donc  $\tau_n = \tau_p = \tau$ . Le calcul complet montre alors que :  $R \propto (np - n_i^2)$  et que la loi de recombinaison sera linéaire (c.à d.  $\tau$  indépendant de  $\delta n$ ) que pour les "faibles injections", comme pour une recombinaison directe.

En pratique, les centres qui jouent un rôle prépondérant dans une recombinaison indirecte sont situés à un niveau d'énergie  $E_R$  voisin de  $E_{Fi}$  ( $\approx$  milieu de la bande interdite) et tels que les coefficients de capture  $c_n$  et  $c_p$  sont très proches. Alors l'expression du taux de recombinaison R se simplifie et se met sous la forme :

$$R = \frac{1}{\tau_0} \frac{np - n_i^2}{2n_i + n + p}$$
(VII.25)

avec  $\tau_0 = 1/N_{RCp} \approx 1/N_{RCn}$ ,  $N_R$  étant la concentration de centres de recombinaison. Cette expression sera particulièrement utile pour étudier l'influence des recombinaisons dans les jonctions pn et les transistors bipolaires. Elle se simplifie encore davantage dans deux cas spécifiques :

Dans un zone désertée (où n, p << ni, np << ni<sup>2</sup>), alors R ≈ -ni/2τ₀ (R < 0 : sa valeur absolue est donc le taux de génération thermique).</li>

• Pour un semi-conducteur dopé (par ex. type *n*), on a  $n_0 >> n_i >> p_0$ ; sous la condition de faible injection :  $n = n_0 + \delta n \approx n_0$ , et puisque  $p = p_0 + \delta p$ , on a :  $R = \delta p / \tau_0$  : ainsi  $\tau_0 = 1/N_{RC_p}$  apparaît comme la durée de vie  $\tau_p$  des minoritaires.

#### VII.3.3. Recombinaison en surface

La surface d'un semi-conducteur, où on peut trouver de nombreux niveaux électroniques ("états de surface"), constitue souvent un site privilégié pour la recombinaison. Le taux de recombinaison en surface Rs (m<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup>) est par définition supposé proportionnel à la concentration volumique de porteurs en excès  $\delta n$  (m<sup>-3</sup>) juste sous la surface. Le coefficient de proportionnalité s, défini par Rs = s $\delta n$ , s'exprime donc en m/s. Pour cela, on l'appelle *vitesse de recombinaison en surface* (ordre de grandeur dans le silicium : s entre 10<sup>-2</sup> et qqs 100 m/s). Ce paramètre s (et le taux de recombinaison Rs) peut être très utile pour définir certaines conditions aux limites dans la résolution des équations relatives au mouvement des porteurs dans un milieu de dimensions finies.

#### VII.4. Photoconductivité

La création de porteurs provoquée par un flux de photons va entraîner une variation de la conductivité :

$$\delta\sigma(t) = q(|\mu_n|\delta n(t) + \mu_p \delta p(t))$$
(VII.26)

L'évolution du nombre de porteurs va dépendre des taux de génération et de recombinaison selon l'équation :

$$\frac{\mathrm{dn}(t)}{\mathrm{dt}} = \mathrm{G}_{\mathrm{n}} - \mathrm{R}_{\mathrm{n}} \tag{VII.27}$$

En <u>régime permanent</u>, il n'y a pas de variations du nombre de porteurs (dn/dt = 0) et, à l'aide de l'équation (VII.21), on écrit :

$$R_n = G_n = \frac{\delta n}{\tau_n}$$
(VII.28)

Si on suppose que la recombinaison se fait par paires (les durées de vie des électrons et des trous sont égales :  $\tau_n = \tau_p = \tau$ ) et que la génération aussi se fait par paires, l'augmentation de conductivité s'écrit alors (en utilisant les équations (VII.26) et (VII.28)) :

$$\delta\sigma = qG\tau(|\mu_n| + \mu_p) \tag{VII.29}$$

L'étude du <u>régime transitoire</u> permet de déterminer la durée de vie des porteurs. Si à l'instant t = 0 la génération de porteurs est arrêtée (G = 0), la densité en électrons et en trous va tendre vers  $n_0$  et  $p_0$ . L'équation (VII.27) devient :

$$\frac{\mathrm{dn}(t)}{\mathrm{dt}} = \frac{\mathrm{d}(n_0 + \delta n)}{\mathrm{dt}} = \frac{\mathrm{d}\delta n}{\mathrm{dt}} = -\frac{\delta n}{\tau}$$
(VII.30)

En faisant l'hypothèse que la durée de vie des porteurs est indépendante de leur nombre (loi de recombinaison linéaire), la solution de l'équation (VII.30) est :

$$\delta n(t) = \delta n_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \tag{VII.31}$$

ce qui permet d'écrire la variation de conductivité :

$$\delta\sigma(t) = q\delta n_0 \left( \left| \mu_n \right| + \mu_p \right) \exp\left( -\frac{t}{\tau} \right)$$
(VII.32)

Cette évolution (dite "décroissance exponentielle de photoconductivité") peut permettre de déterminer expérimentalement la durée de vie  $\tau$  des porteurs.

#### VII.5. La luminescence

La luminescence est une émission de lumière par un processus qui résulte du retour à l'équilibre d'un matériau au préalable excité. L'excitation crée des électrons dans BC qui lors de leur recombinaison donneront naissance à des photons (recombinaison radiative). Selon l'excitation, on distingue plusieurs types de luminescence.

### VII.5.1. Photoluminescence

Une excitation par photons provoque pour certains matériaux une émission de photons à une autre fréquence pendant un temps plus ou moins long après l'arrêt de l'excitation. Si ce temps est court, le matériau est dit fluorescent ; s'il est long, le matériau est phosphorescent. L'émission de photons peut ainsi se faire pendant quelques millisecondes, secondes ou minutes : certaines impuretés introduites dans un matériau piègent des électrons qui seront rendus avec une certaine constante de temps. Des couleurs différentes sont obtenues selon le type d'impuretés introduites par exemple dans le ZnS ( $E_G \approx 3,7 \text{ eV}$ ).

#### VII.5.2. Cathodoluminescence

Les électrons émis par une cathode et accélérés par un champ électrique (tube à vide d'une télévision ou d'un oscilloscope) viennent frapper un matériau et exciter ses électrons. En retournant à leur état d'équilibre, les électrons émettent des photons.

#### VII.5.3. Electroluminescence

La création d'électrons et de trous en excès par injection de porteurs suite à l'application d'une différence de potentiel provoquera une émission de photons lors de la recombinaison de ces électrons et trous. L'exemple le plus courant est la diode électroluminescente (DEL ou LED en Anglais).

# Chapitre VIII. Equations d'évolution (espace et temps)

Pour analyser complètement tous les phénomènes cités (transport, création, recombinaison,..) il faut disposer d'un ensemble d'équations décrivant l'évolution des concentrations de porteurs et de la charge électrique.

# VIII.1. Equations de continuité (ou équations de conservation de chaque type de porteurs)

L'équation de continuité est une équation locale valable en chaque point du semi-conducteur et à chaque instant ; elle s'écrit pour les électrons et pour les trous :

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{n}(t)}{dt} = \frac{d\delta\mathbf{n}(t)}{dt} = \mathbf{G}_{n} - \mathbf{R}_{n} - \operatorname{div}(\vec{j}_{n}) \\ \frac{d\mathbf{p}(t)}{dt} = \frac{d\delta\mathbf{p}(t)}{dt} = \mathbf{G}_{p} - \mathbf{R}_{p} - \operatorname{div}(\vec{j}_{p}) \end{cases}$$
(VIII.1)

## VIII.2. Equation de conservation de la charge

L'une des équations de Maxwell ( $\vec{Rot} \vec{H} = \vec{i} + \partial \vec{D} / \partial t$ ) permet de relier le courant à la variation de la densité de charge :

$$\operatorname{div}(\vec{i}) + \partial \rho / \partial t = 0 \tag{VIII.2}$$

<u>Application</u>: En considérant que les centres impuretés peuvent subir une variation du nombre d'électrons présents  $\delta n_{Imp}$ , la densité de charge (éq. (V.2)) s'écrira :

$$\rho(\vec{r}) = q \left[ p_0 + \delta p - n_0 - \delta n + N_{D0}^{+} - N_{A0}^{-} - \delta n_{Im p} \right] = q \left[ \delta p - \delta n - \delta n_{Im p} \right]$$
(VIII.3)

La simplification se fait en utilisant l'équation (IV.21) valable à l'équilibre thermodynamique. L'expression du courant en fonction des flux en électrons et trous s'écrit :

$$\vec{i} = \vec{i}_n + \vec{i}_p = -q\vec{j}_n + q\vec{j}_p$$
(VIII.4)

En utilisant les équations de continuité (VIII.1), on obtient :

$$div(\vec{i}_{n} + \vec{i}_{p}) + \frac{\partial \rho}{\partial t} = q\left(-G_{n} + R_{n} + \frac{d\delta n(t)}{dt}\right) + q\left(G_{p} - R_{p} - \frac{d\delta p(t)}{dt}\right) + q\left(\frac{d\delta p(t)}{dt} - \frac{d\delta n(t)}{dt} - \frac{d\delta n_{Im p}(t)}{dt}\right)$$
$$= q\left(-G_{n} + R_{n} + G_{p} - R_{p} - \frac{d\delta n_{Im p}(t)}{dt}\right) = 0$$
(VIII.5)

Si les taux de génération des électrons et des trous sont égaux, on arrive à :

$$\frac{d\delta n_{\operatorname{Im} p}(t)}{dt} = R_{n} - R_{p}$$
(VIII.6)

En régime stationnaire  $d\delta n_{Imp}(t)/dt$  est nul, ce qui impliquera :

$$R_{n} = \frac{\delta n}{\tau_{n}} = R_{p} = \frac{\delta p}{\tau_{p}}$$
(VIII.7)

#### VIII.3. Equation de continuité "ambipolaire" (ou généralisée)

Dans le cas où le flux d'électrons et de trous a pour origine la conduction et la diffusion, on peut développer les termes contenant les flux de porteurs (équations (VI.24)) des équations (VIII.1) ; en rappelant que :

$$\begin{cases} \operatorname{div}(a\vec{b}) = \overrightarrow{\operatorname{grad}}(a)\vec{b} + \operatorname{adiv}(\vec{b}) \\ \operatorname{div}\left(\overrightarrow{\operatorname{grad}}(a)\right) = \nabla^2 a = \Delta a \end{cases}$$
(VIII.8)

on obtient alors :

r

$$\begin{cases} \frac{\mathrm{dn}(t)}{\mathrm{dt}} = \mathrm{G}_{n} - \mathrm{R}_{n} - \mathrm{div}(\vec{j}_{n}) = \mathrm{G}_{n} - \mathrm{R}_{n} + n|\mu_{n}|\mathrm{div}(\vec{E}) + |\mu_{n}|\vec{E}\,\mathrm{grad}(n) + \mathrm{D}_{n}\Delta n \\ \frac{\mathrm{dp}(t)}{\mathrm{dt}} = \mathrm{G}_{p} - \mathrm{R}_{p} - \mathrm{div}(\vec{j}_{p}) = \mathrm{G}_{p} - \mathrm{R}_{p} - p\mu_{p}\mathrm{div}(\vec{E}) - \mu_{p}\vec{E}\,\mathrm{grad}(p) + \mathrm{D}_{p}\Delta p \end{cases}$$
(VIII.9)

En faisant l'hypothèse de quasi-neutralité, c'est-à-dire  $\delta n \approx \delta p$  (si  $\delta n_{Imp} \ll \delta n$ ,  $\delta p$ ), on a :

$$\vec{\frac{dn(t)}{dt}} \approx \vec{\frac{dp(t)}{dt}}$$

$$\Delta n \approx \Delta p$$
(VIII.10)

Mais l'utilisation de l'équation de Poisson (qui conduit alors à div $\dot{E} \approx 0$ ) est problématique dans le système d'équations (VIII.9).

Sous l'hypothèse que les taux de génération et de recombinaison des électrons et des trous sont identiques, on élimine le terme en divÉ entre les deux équations (VIII.9) en multipliant l'équation dn(t)/dt par  $p\mu_p$  et l'équation dp(t)/dt par  $n|\mu_n|$ . En additionnant, on obtient l'équation de continuité "ambipolaire":

$$\frac{\mathrm{dn}(t)}{\mathrm{dt}} = \frac{\mathrm{dp}(t)}{\mathrm{dt}} = \mathrm{G} - \mathrm{R} - \mu^* \vec{\mathrm{E}} \operatorname{grad}(\mathrm{n} \text{ ou } \mathrm{p}) + \mathrm{D}^* \Delta \mathrm{n} \text{ ou } \mathrm{p}$$
(VIII.11)

μ\* et D\* sont respectivement la mobilité ambipolaire et le coefficient de diffusion ambipolaire :

$$\mu^{*} = \frac{|\mu_{n}|\mu_{p}(n-p)}{n|\mu_{n}| + p\mu_{p}}$$
(VIII.12)

$$D^* = \frac{(n+p)D_nD_p}{nD_n + pD_p}$$
(VIII.13)

Dans un semi-conducteur extrinsèque (et pour une <u>injection faible</u>),  $\mu^*$  est égal à la mobilité des minoritaires et D<sup>\*</sup> est égal au coefficient de diffusion des minoritaires. Cette équation montre donc que dans un semi-conducteur extrinsèque, il suffira de résoudre l'équation de continuité relative aux porteurs <u>minoritaires</u> (et d'utiliser la quasi-neutralité).

#### VIII.4. Exemples d'application

#### VIII.4.1. Durée de vie et longueur de diffusion

Pour trouver l'expression de la longueur de diffusion des porteurs, on peut prendre l'exemple d'un semi-conducteur de type p soumis à une illumination. On fait l'hypothèse que la création de porteurs ne se fait qu'à la surface (rayonnement très absorbé) et qu'aucun champ électrique n'est appliqué au matériau. L'équation (VIII.11) (ou (VIII.1) pour les minoritaires) donne (en ne considérant que la direction x) :

$$\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}t} = -\mathrm{R} - \mathrm{div}(\bar{j}_n) = -\frac{\delta n}{\tau_n} + \mathrm{D}_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$$
(VIII.14)

En régime permanent, le nombre de porteurs ne varie pas avec le temps et on arrive à l'équation différentielle du deuxième ordre pour les porteurs minoritaires (les électrons ici) :

$$\frac{\partial^2 (n_0 + \delta n)}{\partial x^2} - \frac{\delta n}{\tau_n D_n} = \frac{\partial^2 \delta n}{\partial x^2} - \frac{\delta n}{\tau_n D_n} = 0$$
(VIII.15)

La solution de cette équation est :

$$\delta n = A_1 \exp\left(-\frac{x}{\sqrt{\tau_n D_n}}\right) + A_2 \exp\left(\frac{x}{\sqrt{\tau_n D_n}}\right)$$
(VIII.16)

où A<sub>1</sub> et A<sub>2</sub> sont des constantes à déterminer d'après les conditions aux limites.  $\sqrt{\tau_n D_n}$  apparaît comme une longueur. Elle est appelée "longueur de diffusion"; c'est la distance moyenne de pénétration par diffusion, et avant recombinaison, des électrons créés en surface.

$$L_n = \sqrt{\tau_n D_n}$$
(VIII.17)

Si on suppose que le semi-conducteur est très long (>>  $L_n$ ), cela rend nulle la constante  $A_2$  $(\delta n(x \rightarrow \infty) = 0)$  et on obtient :

$$\delta n = \delta n_0 \exp\left(-\frac{x}{L_n}\right) \tag{VIII.18}$$

où  $\delta n_0$  est la valeur de  $\delta n$  en x = 0. Cette équation est illustrée figure (VIII.1.a).

La longueur de diffusion peut varier selon le cristal et sa pureté de quelques 10  $\mu$ m à quelques mm.



**Figure VIII.1.** Variation de la densité de l'excès de porteurs minoritaires (électrons pour un semi-conducteur de type p) lorsqu'il y a création de porteurs en surface **a.** pour une longueur de matériau très grande devant la longueur de diffusion. **b.** pour des longueurs W de matériau diverses.

Si tous les porteurs en excès sont extraits à une distance W, les deux conditions aux limites deviennent :

$$\begin{cases} \delta n(x = 0) = \delta n_0 \\ \delta n(x = W) = 0 \end{cases}$$
(VIII.19)

L'équation (VIII.16) amène au système de deux équations et deux inconnues :

$$\begin{cases} \delta n_0 = A_1 + A_2 \\ 0 = A_1 \exp\left(-\frac{W}{L_n}\right) + A_2 \exp\left(\frac{W}{L_n}\right) \end{cases}$$
(VIII.20)

qui donne comme solution (sh(a) = [exp(a) - exp(-a)]/2):

$$\begin{aligned} A_{1} &= -\frac{\delta n_{0}}{sh\left(\frac{W}{L_{n}}\right)} exp\left(-\frac{W}{L_{n}}\right) \\ A_{2} &= \frac{\delta n_{0}}{sh\left(\frac{W}{L_{n}}\right)} exp\left(\frac{W}{L_{n}}\right) \end{aligned} \tag{VIII.21}$$

On arrive finalement à l'expression de la variation de la densité de porteurs qui est aussi illustrée à la figure (VIII.1.b) :

$$\delta n(x) = \frac{\delta n_0}{sh\left(\frac{W}{L_n}\right)} sh\left(\frac{W-x}{L_n}\right)$$
(VIII.22)

Pour W >> L<sub>n</sub> les équations (VIII.18) et (VIII.22) sont égales et pour W << L<sub>n</sub> l'équation (VIII.22) tend vers l'équation d'une droite  $(\delta n(x) = \delta n_0[(W-x)/W] = \delta n_0(1-x/W))$ . Cette particularité est utilisée dans certains composants comme la diode courte ou la base d'un transistor bipolaire.

#### <u>Courant de diffusion :</u>

Puisqu'on a supposé le champ électrique négligeable, les seuls flux de porteurs existants sont liés à la diffusion et aux profils de distribution des porteurs en excès. Pour les porteurs minoritaires (les électrons dans notre cas), on vient de calculer quelques profils possibles ; pour les porteurs majoritaires, l'équation de quasi-neutralité nous donne  $\delta p(x) \approx \delta n(x)$ . On peut donc calculer les courants de diffusion correspondants.

Pour les électrons, par exemple, on a :

$$i_{ndiff}(x) = (-q)j_{ndiff}(x) = qD_n \frac{d\delta n(x)}{dx}$$
(VIII.23)

d'où :

Pour un échantillon semi-infini (W >> L<sub>n</sub>, éq. (VIII.18) :

$$i_{ndiff}(x) = -q \frac{D_n}{L_n} \delta n(x)$$
(VIII.24)

(ce résultat sera utile dans le cas d'une diode dite "longue");

Pour un échantillon de dimension W arbitraire ou courte (éq. (VIII.22)), en surface :

$$i_{ndiff}(0) = -q \frac{D_n}{L_n} \delta n_0 \frac{1}{th(W/L_n)} \approx -q \frac{D_n}{L_n} \delta n_0 (si \ W \ll L_n)$$
(VIII.25)

à l'extrémité W :

$$i_{ndiff}(W) = -q \frac{D_n}{L_n} \delta n_0 \frac{1}{sh(W/L_n)} \approx -q \frac{D_n}{W} \delta n_0 (si \ W \ll L_n) = i_{ndiff}(0)$$
(VIII.26)

**<u>Remarque</u>** : ces résultats seront utilisés dans le cas d'une diode courte et pour le transistor bipolaire.

#### VIII.4.2. Temps de relaxation diélectrique et longueur de Debye

Soit, par exemple, un semi-conducteur de type p ayant un excès de trous (c'est-à-dire de porteurs majoritaires) tel que  $\delta p \ll p_0$ . A priori, il n'y a pas suffisamment d'électrons (minoritaires) pour les neutraliser et les recombiner. La densité de charge est donc égale à q $\delta p$  et l'équation de Poisson permet d'écrire :

$$\vec{\nabla}\vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_{\rm SC}} = \frac{q}{\epsilon_{\rm SC}}\delta p \tag{VIII.27}$$

En considérant que le courant n'est dû qu'aux trous, la conservation de la charge mène à :

$$\vec{\nabla}\vec{i}_{p} = -\frac{\partial\rho}{\partial t} = -q\frac{\partial\delta p}{\partial t} = \vec{\nabla}\left(\sigma_{p_{0}}\vec{E} - qD_{p}\vec{\nabla}\delta p\right) = \sigma_{p_{0}}\vec{\nabla}\vec{E} - qD_{p}\nabla^{2}\delta p = \frac{q}{\epsilon_{SC}}\sigma_{p_{0}}\delta p - qD_{p}\nabla^{2}\delta p$$
(VIII.28)

qui est une équation différentielle du premier ordre en t et du deuxième ordre en x (pour un système à une dimension) :

$$\frac{\partial \delta p}{\partial t} = -\frac{\sigma_{p_0}}{\varepsilon_{SC}} \delta p + D_p \frac{\partial^2 \delta p}{\partial x^2}$$
(VIII.29)

La résolution temporelle de cette équation donne :

$$\delta p(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = \delta p(\mathbf{x}, 0) \exp\left(-\frac{\mathbf{t}}{\tau_{\text{diel}}}\right)$$
(VIII.30)

où  $\tau_{diel} = \epsilon_{SC} / \sigma_{p_0}$  est le "temps de relaxation diélectrique". Pour une conductivité  $\sigma_p$  de  $10^2 \ \Omega^{-1} m^{-1}$  et une permittivité du semi-conducteur ( $\epsilon_{SC}$ ) égale pour le silicium à 12 fois celle du vide, on obtient un temps de relaxation diélectrique de l'ordre de  $10^{-12}$  s. On en déduit donc que dans le silicium (homogène), la neutralité électrique se rétablit en un temps égal à quelques picosecondes.

La résolution spatiale de l'équation (VIII.29) donne :

$$\delta p(x,t) = \delta p(0,t) \exp\left(-\frac{x}{L_D}\right)$$
 (VIII.31)

où  $L_D$  est la longueur de Debye (ici pour un semi-conducteur de type p) :

$$L_{D} = \sqrt{D_{p}\tau_{diel}} = \sqrt{\frac{kT}{q^{2}}\frac{\varepsilon_{SC}}{p_{0}}} = \sqrt{\frac{kT}{q^{2}}\frac{\varepsilon_{SC}}{N_{A}}}$$
(VIII.32)

 $L_D$  apparaît donc comme la distance sur laquelle s'effectue la neutralisation d'une charge d'espace (on dit parfois longueur d'écran), c. à d. la transition entre une ZCE et une zone neutre. Pour une densité des porteurs à l'équilibre thermodynamique de  $10^{15}$  cm<sup>-3</sup>, on obtient une longueur de Debye de l'ordre de 0,1 µm.

Dans le cas d'un semi-conducteur proche de l'intrinsèque la longueur de Debye s'écrit :

$$L_{\rm D} = \sqrt{\frac{kT}{q^2} \frac{\epsilon_{\rm SC}}{n_0 + p_0}} \tag{VIII.33}$$

# Chapitre IX. Fluctuations et bruit électrique

Jusqu'à présent les grandeurs physiques considérées, telles que la vitesse des porteurs  $v_{n,p}$ , leur mobilité  $\mu_{n,p}$ , la conductivité  $\sigma_{n,p}$ , le courant I et la tension V doivent être prises comme des valeurs moyennes ("statiques"). Elle peuvent en effet présenter des fluctuations. De telles fluctuations correspondent à du "bruit", qui sera exprimé et mesuré en valeur efficace. Par exemple, la valeur (efficace) du bruit d'une grandeur b(t) sera :

$$\mathbf{b}_{\rm eff} = \sqrt{\mathbf{b}^2(\mathbf{t})} \tag{IX.1}$$

où  $b^{2}(t)$  est la valeur quadratique moyenne et a pour expression :

$$\overline{\mathbf{b}^{2}(\mathbf{t})} = \lim_{\mathbf{T} \to \infty} \frac{1}{\mathbf{T}} \int_{(\mathbf{T})}^{\mathbf{b}^{2}(\mathbf{t}) d\mathbf{t}}$$
(IX.2)

Une analyse des caractéristiques temporelles du bruit est souvent assez difficile et on préfère étudier ses propriétés dans le domaine fréquentiel en utilisant la densité spectrale de puissance (analogie avec l'étude du filtrage). En faisant passer la grandeur b dans des filtres passe-bande de largeur  $\Delta f$  autour de f, il est possible de reconstituer le spectre en fréquence de b. On aura alors :

$$\mathbf{b}_{\text{eff}}^{2}(\mathbf{f}) = \mathbf{S}_{\mathbf{b}}(\mathbf{f})\Delta \mathbf{f} = \mathbf{g}_{\mathbf{b}}(\mathbf{f}) \tag{IX.3}$$

où  $S_b(f)$  est la densité spectrale de puissance de b(t), qui est aussi la transformée de Fourier de l'autocorrélation de b(t).

On indique ci-dessous les principaux types de bruit intervenant dans les composants à semiconducteur.

#### IX.1. Bruit de grenaille ("shot noise")

Le bruit de grenaille a pour origine l'aspect granulaire de l'électricité. En effet, l'instant d'émission des électrons allant d'une électrode à une autre est aléatoire. Ainsi, l'arrivée des électrons au niveau de l'anode ne sera pas continue mais présentera les mêmes fluctuations que l'émission.

Pour avoir une corrélation totale entre émission et collection, il ne doit pas y avoir de recombinaison (nombre d'électrons émis égal à celui récolté) ni de collisions (électrons retardés) durant le transit inter-électrodes, ce qui signifie que le temps de transit,  $\tau_t$ , est très inférieur au temps entre collisions,  $\tau_r$  (la durée de vie  $\tau$  des électrons dans un semi-conducteur étant très supérieure au temps entre collisions). Notons que :

$$\tau_{t} = \frac{L}{v_{moy}}$$
(IX.4)

où L est la distance inter-électrode et  $v_{moy}$  la vitesse moyenne des électrons.

Le courant d'électrons peut s'écrire comme la somme d'impulsions de Dirac représentant l'émission de chaque électron aux instants (aléatoires) t<sub>i</sub> :

$$i(t) = q \sum \delta(t - t_i)$$
(IX.5)

A partir de cette équation (IX.5) et en supposant que la suite des instants d'émission t<sub>i</sub> est poissonnienne, on trouve (c.f. cours de traitement du signal) l'expression de la densité spectrale du courant (A<sup>2</sup>Hz<sup>-1</sup>) appelée dans ce cas précis "relation de Schottky" :

$$S_{I}(f) = 2qI_{0} \tag{IX.6}$$

où I<sub>0</sub> est la valeur moyenne du courant. L'expression de cette densité spectrale est indépendante de la fréquence, ce qui fait de ce bruit un "bruit blanc". Dans une bande de fréquence B, les fluctuations de courant auront une valeur efficace i<sub>eff</sub> telle que :

$$i_{eff}^2 = 2qI_0B$$
(IX.7)

Ce type de bruit s'observe dans les tubes à vide et dans tous les dispositifs comportant des régions où les porteurs ne font pas de collisions, telles que les zones de charge d'espace des dispositifs à jonctions : p-n, M-SC, transistors bipolaires

#### IX.2. Bruit thermique (de Nyquist ou de Johnson)

Ce bruit apparaît lorsque le temps entre collisions ne peut plus être négligé par rapport au temps de transit. Les instants de collision sont aléatoires ce qui implique nécessairement une relation entre le bruit et la résistance puisque celle-ci dépend de  $\tau_r$  (voir paragraphe VI.2. Conductivité); de plus ce bruit sera indépendant du champ électrique appliqué (sauf à très fort champ en raison de l'effet de porteurs chauds). En se plaçant dans le cas particulier où  $\tau_r \ll \tau_t$ , on exprime la densité spectrale des fluctuations de tension ou de courant aux bornes d'un dispositif de résistance R (ou de conductance G) par :

$$S_{V}(f) = 4kTR \tag{IX.8}$$

$$S_{I}(f) = 4kT\frac{1}{R} = 4kTG$$
(IX.9)

On constate que le bruit aux bornes d'un tel dispositif est blanc (indépendant de la fréquence). La figure (IX.1) donne les deux représentations possibles pour rendre compte du bruit dans une résistance. R<sub>idéale</sub> est la résistance sans bruit et les sources de bruit ont pour valeur quadratique moyenne :



Figure IX.1. Représentation du bruit dans une résistance a. en fonction de sa tension de bruit. b. en fonction de son courant de bruit.

Dans le cas où l'impédance du dispositif est complexe, Z(f) = 1/Y(f), les densités spectrales de tension et de courant ont pour expression :

$$\begin{cases} S_{V}(f) = 4kT \operatorname{Re}(Z(f)) \\ S_{I}(f) = 4kT \operatorname{Re}(Y(f)) \end{cases}$$
(IX.11)

La relation entre les deux densités spectrales est donnée par :

$$\mathbf{S}_{\mathrm{V}}(\mathbf{f}) = \left| \mathbf{Z}(\mathbf{f}) \right|^{2} \mathbf{S}_{\mathrm{I}}(\mathbf{f}) \tag{IX.12}$$

#### IX.3. Bruit de génération - recombinaison (GR)

Le nombre instantané de porteurs est susceptible de varier en raison des phénomènes de génération et recombinaison. Pour que de telles fluctuations soient observables, il faut que la durée de vie des porteurs,  $\tau$ , soit très inférieure au temps de transit. L'expression de la densité spectrale de courant est proportionnelle à  $I_0^2 \tau / [1 + (2\pi f \tau)^2]$  qui est typique d'un spectre "Lorentzien" illustré à la figure (IX.2).



**Figure IX.2.** Densité spectrale de courant de type Lorentzien.

#### IX.4. Bruit en 1/f (ou de scintillement ou "Flicker noise")

Le bruit "en 1/f" (dont la densité spectrale varie en 1/f) ou  $1/f^{\gamma}$  avec  $0.8 < \gamma < 1.2$  vérifie les relations (typiques de fluctuations de résistance) :

$$\frac{S_V(f)}{V_0^2} = \frac{S_I(f)}{I_0^2} = \frac{S_R(f)}{R_0^2}$$
(IX.13)

On considère qu'il a deux origines possibles dans un semi-conducteur :

Les fluctuations de mobilité des porteurs dans le volume.

$$\frac{S_V(f)}{V_0^2} = \frac{S_I(f)}{I_0^2} = \frac{S_R(f)}{R_0^2} = \frac{\alpha_H}{N_0 f}$$
(IX.14)

où  $\alpha_{\text{H}}$  est le paramètre de Hooge et  $N_0$  le nombre total de porteurs dans le volume considéré.

• Les effets "de surface" surtout observés dans les transistors MOS. Les états situés à l'interface et à l'intérieur de l'isolant capturent et relâchent les porteurs, avec diverses constantes de temps  $\tau_i$ . Le bruit 1/f est donc la somme d'une multitude de spectres Lorentziens de fréquences de coupure différentes comme l'indique la figure (IX.3), si la distribution g( $\tau$ ) des constantes de temps de piégeage  $\tau_i$  est en 1/ $\tau$ . En effet si g( $\tau$ )  $\propto$  1/ $\tau$  et pour 1/2 $\pi\tau_{max} < f < 1/2\pi\tau_{min}$ :

$$\begin{split} S_{I}(f) &\propto {I_{0}}^{2} \sum_{i} A_{i} \frac{\tau_{i}}{1 + (2\pi f \tau_{i})^{2}} \propto {I_{0}}^{2} \int_{\tau_{min}}^{\tau_{max}} \frac{\tau}{1 + (2\pi f \tau)^{2}} g(\tau) d\tau \\ &\propto {I_{0}}^{2} \frac{1}{2\pi f} [\operatorname{Arctg}(2\pi f \tau_{max}) - \operatorname{Arctg}(2\pi f \tau_{min})] \\ &\approx {I_{0}}^{2} \frac{1}{4f} \end{split}$$





**Figure IX.3.** Bruit en 1/f résultant de la somme de spectres Lorentziens.

# Chapitre X. Contact entre deux matériaux différents - Hétérostructures

## X.1. Introduction

Il existe diverses catégories de contact entre deux matériaux :

- Homo-jonction : c'est le contact entre deux parties différentes d'un même semiconducteur par exemple les diodes à semi-conducteur qui sont constituées de deux parties dopées différemment (jonctions pn).
- Hétéro-jonction : c'est l'association entre deux semi-conducteurs de nature différente.
- Jonction Métal SC : par exemple les diodes Schottky ou les contacts ohmiques.
- Structure MIS (Métal Isolant Semi-conducteur). Lorsque l'isolant est de type oxyde la structure est dite MOS (capacité et transistor). Ces structures seront étudiées ultérieurement.

On définira tout d'abord les grandeurs qui déterminent le transfert de charges entre deux matériaux, afin d'étudier la façon dont on peut commander le passage ou contrôler les concentrations de ces charges.

#### X.2. Travail de sortie - Affinité électronique - Barrière de potentiel

Dans un métal (fig. (X.1.a)), le niveau  $E_{FM}$  représente l'énergie maximale que peut avoir un électron à l'équilibre. Pour extraire un électron il faut qu'il atteigne le niveau énergie  $E_0$  (niveau "du vide"). Le travail de sortie  $\Phi_M$  est défini comme l'énergie minimale qu'il faut fournir à un électron pour l'arracher au métal (électron sans vitesse à la sortie du métal). Les valeurs usuelles de  $\Phi_M$  sont comprises entre 2 et 5,5 eV.

$$\Phi_{\rm M} = E_0 - E_{\rm FM} \tag{X.1}$$

Pour un semi-conducteur, on peut aussi définir un travail de sortie  $\Phi_{SC}$  comme la différence entre le niveau du vide et le niveau de Fermi dans le semi-conducteur :

$$\Phi_{\rm SC} = E_0 - E_{\rm FSC} \tag{X.2}$$

Mais comme dans un SC non dégénéré il n'y a pas d'électron à l'énergie  $E_{FSC}$  ( $E_{FSC}$  est dans la bande interdite), on définit aussi l'affinité électronique  $\chi$  comme l'énergie à apporter à un électron "libre" (bas de la bande de conduction) pour l'arracher du semi-conducteur. Elle est voisine de 4 eV pour le Silicium, GaAs et Ge, et de à 1,1 eV pour l'oxyde de Silicium (SiO<sub>2</sub>). L'ensemble de ces paramètres sont indiqués sur la figure (X.1.a) qui représente la mise en contact d'un métal et d'un SC. On introduit aussi la barrière de potentiel (ou barrière de Schottky)  $\Phi_b$  donnée par la relation de Schottky :

$$\Phi_{\rm b} = E_{\rm C} - E_{\rm FM} = \Phi_{\rm M} - \chi \tag{X.3}$$

A l'équilibre thermodynamique le niveau de Fermi est constant dans toute la structure, c'està-dire qu'il n'y a pas de différence entre  $E_{FM}$  et  $E_{FSC}$ . Il y a donc un échange de charges (tel que  $Q_M + Q_{SC} = 0$  où  $Q_M$  et  $Q_{SC}$  sont les charges apparues respectivement coté métal et coté SC) qui provoque l'apparition d'une courbure des bandes et d'une zone de charge d'espace à l'interface métal – SC; cette ZCE qui s'étend essentiellement côté SC, car la concentration d'électrons libres est bien plus grande dans le métal. La figure (X.1.b) illustre ce contact à l'équilibre et met en évidence le *potentiel de surface* Vs qui est la barrière que doit franchir un électron libre du semi-conducteur pour passer dans le métal.

$$-qV_{S} = E_{C} - E_{C} = \Phi_{b} - (E_{C} - E_{FSC}) = \Phi_{M} - \Phi_{SC}$$
 (X.4)

 $\Phi_b$  représente la barrière que doit franchir un électron pour passer du métal au SC ; la relation (X.3) montre qu'elle devrait dépendre de la nature du métal déposé (par  $\Phi_M$ ). Or cette propriété n'est souvent pas observée avec les semi-conducteurs usuels



Figure X.1.a. Contact Métal - Semi-conducteur avant équilibre. b. Contact Métal - Semiconducteur à l'équilibre thermodynamique.

#### X.3. Contact Métal - semi-conducteur réel

#### X.3.1. L'oxyde "natif"

Lors de la fabrication des contacts, un oxyde natif (< 20 Å) peut séparer le métal du SC. Cet oxyde mince sera franchi par les porteurs par effet tunnel. Mais la chute de potentiel  $V_{ox}$  qui apparaît aux bornes de l'oxyde influence les hauteurs des barrières vues par les électrons ( $\Phi_b$  et potentiel de surface Vs). On a :

$$-qV_{S} = \Phi_{M} - \Phi_{SC} + qVox \tag{X.5}$$

ainsi que :

$$\Phi_{\rm b} = E_{\rm CS} - E_{\rm FM} = \Phi_{\rm M} - \chi + q V_{\rm ox} \tag{X.6}$$

L'oxyde natif se comporte comme une capacité ayant du coté métal une charge  $Q_M = -Q_{SC}$  (Cm<sup>-2</sup>), ce qui permet d'exprimer  $V_{ox}$ :

$$V_{\rm ox} = \frac{Q_{\rm M}}{C_{\rm ox}} \tag{X.7}$$

où  $C_{ox}$  est la capacité de l'oxyde par unité de surface (Fm<sup>-2</sup>) qui dépend de son épaisseur  $t_{ox}$  et de sa permittivité  $\varepsilon_{ox}$ .

$$C_{ox} = \frac{\varepsilon_{ox}}{t_{ox}}$$
(X.8)

Cet approche permet de décrire correctement le contact métal - SC dans le cas de semiconducteurs ioniques (ZnS, GaS, ZnO, AlN) ayant une surface de bonne qualité. Mais les relations (X.5) et (X.6) montrent qu'on devrait, là encore, observer une dépendance des hauteurs de barrière avec la nature du métal.



**Figure X.2.** Contact Métal - semiconducteur séparé par une couche d'oxyde natif de quelques Å (contact réel).

#### X.3.2. Les états d'interface (ou états de surface)

Lorsque la surface du semi-conducteur n'est pas parfaite, ce qui est facilement le cas des SC covalents (Si, Ge, GaAs, GaP, InP, SiC, AlAs, InSb,...), elle présente des états à l'interface qui agissent comme des "pièges" en capturant des électrons ou des trous du semi-conducteur.

Ces pièges sont appelés "états d'interface" et il en existe deux types :

- Les donneurs qui sont neutres s'ils sont occupés (par un électron) et chargés positivement s'ils sont inoccupés (occupés par un trou).
- Les accepteurs qui sont neutres si inoccupés (occupés par un trou) et chargés négativement si occupés (par un électron).

La limite d'occupation des états par les électrons est donnée par la position du niveau de Fermi à l'interface comme l'indique la figure (X.3). D'après la statistique de Fermi-Dirac, on peut dire que les états situés sous  $E_{FSC}$  sont occupés par les électrons (ou vides de trous) et ceux situés au dessus de  $E_{FSC}$  sont vides d'électrons.



Etat inoccupé
 Etat occupé

**Figure X.3.** Diagramme de bandes montrant les états d'interface et leur occupation. Les états en dessous de E<sub>FSC</sub> sont occupés par les électrons (inoccupés par les trous) et ceux au dessus de E<sub>FSC</sub> sont inoccupés par les électrons (occupés par les trous).

La probabilité d'occupation par un électron d'un état d'interface situé au niveau d'énergie  $E_t$  dans le gap du semi-conducteur a pour expression :

$$f_{t}(E_{t}) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_{t} - E_{FSC}}{kT}\right)}$$
(X.9)

Ces états "piègent" une charge  $Q_{SS}$  (charge d'interface, notée aussi parfois  $Q_{it}$ ) qui dépend de la densité des états de surface et du potentiel de surface. La neutralité électrique globale devant être conservée, on a :

$$Q_{\rm M} = -(Q_{\rm SS} + Q_{\rm SC}) \tag{X.10}$$

Lors d'un contact Métal - Semi-conducteur pour lequel la densité des états de surface est élevée, le métal va échanger des électrons essentiellement avec les états d'interface, ce qui rend Vs à peu près indépendant du métal; on a alors une "barrière de Bardeen" où les états d'interface "écrantent" le SC par rapport au métal. Expérimentalement on constate alors que  $\Phi_b$ est de l'ordre de 2/3 de la bande interdite du semi-conducteur.

#### X.4. Description qualitative de la relation I(V) d'un contact M - SC

#### X.4.1. Contact redresseur ("diode SCHOTTKY")

Ce sera le cas pour un contact entre un métal et un SC faisant apparaître une région désertée dans la ZCE du SC (par exp. SC type *n* et courbure de bandes vers le haut, c.à d.  $\Phi_M > \Phi_{SC}$ ).



L'application d'une tension  $V_{ext}$  aux bornes d'un contact Métal - Semi-conducteur (figure (X.4.a)) donne naissance à un courant I (figure (X.4.b)) qui peut s'expliquer de façon qualitative en considérant les figures (X.5).

A l'équilibre thermodynamique (figure (X.5.a), c'est-à-dire lorsqu'aucun potentiel extérieur n'est appliqué aux bornes de la structure, le flux d'électrons qui peuvent franchir la barrière M  $\rightarrow$  SC ( $\Phi_b$ ) est équilibré par le flux d'électrons pouvant franchir la barrière SC  $\rightarrow$  M (-qVs) donc I = 0.

Pour simplifier, on suppose la couche d'oxyde (natif) négligeable. La région la plus résistive de la structure M - SC étant la ZCE (car elle est désertée dans notre cas), la tension V<sub>ext</sub> se retrouve essentiellement sur cette ZCE.

L'application d'une tension  $V_{ext}$  positive abaisse la barrière de potentiel Vs que voient les électrons du semi-conducteur alors que la barrière que voient les électrons du métal ne change pas. Il y a donc un déséquilibre entre les deux flux en faveur du passage d'électrons du SC vers le métal. Le courant I (positif) induit augmente avec l'augmentation de  $V_{ext}$ , comme augmente pour un électron du SC la probabilité de passer vers le métal, c. à d. comme  $exp(qV_{ext}/kT)$ .





**Figure X.5.** Structure Métal - Semiconducteur type n, avec  $\Phi_M > \Phi_{SC}$ .

- a. Pour  $V_{ext} = 0$ , c. à d. à l'équilibre thermodynamique.
- b. Pour  $V_{ext} > 0$ , il y a apparition d'un flux d'électrons du SC vers le métal.
- c. Pour  $V_{ext} < 0$ , il y a apparition d'un flux d'électrons du métal vers le SC.

L'application d'une tension négative augmente la barrière vue par les électrons du SC et il y a un déséquilibre entre les flux en faveur du passage d'électrons du métal vers le SC. Le courant I résultant (négatif) sature très vite car la probabilité pour un électron du SC de franchir Vs décroît exponentiellement avec  $|V_{ext}|$  alors que la probabilité de franchir  $\Phi_b$  pour un électron du métal ne dépend pas de  $V_{ext}$ .

Ainsi pour  $V_{ext} > 0$ , on a  $I \approx I_{M \rightarrow SC} \propto I_1 \times exp(qV_{ext}/kT)$  et pour  $V_{ext} < 0$ ,  $I \approx -I_{SC \rightarrow M} = -I_{sat}$ . Or  $I = I_{M \rightarrow SC} - I_{SC \rightarrow M} = I_1 \times exp(qV_{ext}/kT) - I_{sat}$  et on doit avoir I = 0 pour  $V_{ext} = 0$ , d'où :

$$I = I_{sat} \left[ exp\left(\frac{qV_{ext}}{kT}\right) - 1 \right]$$
(X.11)

#### **Remarques**:

On constate donc, d'après l'analyse qualitative, que le courant dans une jonction M - SC (diode Schottky) est transporté par les porteurs *majoritaires* du semi-conducteur. Cette propriété est à l'origine des caractéristiques dynamiques de rapidité des diodes Schottky, qui sont pratiquement exemptes d'effets de "charge stockée" propres aux jonctions pn.

Le courant de saturation en inverse I<sub>sat</sub> d'une jonction M - SC est beaucoup plus important ( $\approx$  10<sup>6</sup>) que celui d'une jonction pn. Il en résulte que pour faire circuler un courant fixé (par exp. 1 mA) en polarisation directe, la polarisation nécessaire pour une jonction M - SC ("coude de diode") est nettement plus faible que pour une jonction pn (d'où l'utilisation de diodes M - SC, en parallèle sur la jonction base-collecteur des transistors dans la filière TTL - Schottky).

#### X.4.2. Contact ohmique

Le contact M - SC va se comporter comme un contact ohmique lorsque, dans le SC, la ZCE sera une région <u>d'accumulation</u> de porteurs majoritaires, par exemple si le SC est de type p

lorsque  $\Phi_M > \Phi_{SC}$ . Alors la région la plus résistive dans une telle structure M - SC est la zone neutre du SC, et on obtient un contact dont la résistance est celle de cette zone (et aux bornes de laquelle se retrouve l'essentielle de la tension appliquée V<sub>ext</sub> (c.f. Fig. (X.6)).





Pour minimiser la résistance du contact, le SC sera très dopé ( $p^+$  ou  $n^+$ ) voire dégénéré (ce qui permet aussi de réduire l'action des états d'interface qui seront "saturés" par les porteurs majoritaires).

#### X.5. Hétérojonction

Une jonction entre deux matériaux SC différents est appelée "hétérojonction" ; si les deux SC constituant l'hétérojonction sont de même type (p ou n), on dit que l'hétérojonction est "isotype" ; sinon elle est dite "anisotype".

En général, on réalise une hétérojonction en faisant croître une couche épitaxiée d'un SC sur un autre SC. Il faut pour cela que les deux SC aient les mêmes symétries cristallines (dans le plan de l'interface), des paramètres cristallins (telle que la constante du réseau) voisins, et des coefficients de dilatation proches puisque l'épitaxie se réalise à température élevée.

On rappelle que les hétérojonctions sont à la base de réalisations de dispositifs à hautes performances, en particulier dans les domaines des hautes fréquences et de l'optoélectronique (transistors à effet de champ "HEMT", ou bipolaire à hétérojonction "HBT", diodes électroluminescentes ou diodes laser). Pour pouvoir envisager les divers champs d'application des hétérojonctions, il faut envisager les propriétés spécifiques qu'elles procurent (barrières de potentiel) vis-à-vis du flux des porteurs qui les traversent, comme dans un contact M-SC, mais aussi vis-à-vis des puits de potentiel créés et du transport de porteurs dans ces puits, parallèlement à l'interface (comme dans une structure MOS).

Nous définirons les paramètres clés permettant une analyse qualitative simple mettant en évidence les principales propriétés des hétérojonctions.

#### X.5.1. Diagramme des bandes d'énergie

#### <u>Sans contact entre les deux SC :</u>

On sait positionner les bandes d'énergie à partir du "niveau du vide" et des grandeurs déjà définies dans l'étude du contact M-SC (en particulier les travaux de sortie  $\Phi_{SC1,2}$  et les affinités  $\chi_{1,2}$ ) comme cela est indiqué à la figure (X.7).

On notera l'apparition de deux paramètres importants : les décalages  $\Delta E_{C0} = E_{C2} - E_{C1}$  et  $\Delta E_{V0} = E_{V2} - E_{V1}$  des bandes de conduction et de valence. On remarque que  $\Delta E_{C0} = \chi_1 - \chi_2$ .



**Figure X.7.** Bandes d'énergie des SC 1 et 2 lorsqu'ils ne sont pas en contact. Notons que :

$$\Delta E_G = E_{G2} - E_{G1} = \Delta E_{C0} - \Delta E_{V0}$$

#### <u>Hétérojonction à l'équilibre :</u>

Les deux SC sont en contact, et la structure ainsi réalisée est à l'équilibre ( $E_{F1} = E_{F2} = E_F$ ). La figure (X.8.a) montre les niveaux d'énergie observés loin de l'interface. On constate que la condition d'équilibre  $E_{F1} = E_{F2}$  implique l'apparition d'une ddp interne  $V_{int} = V_d$  provenant de l'échange de charges qui a lieu (avec apparition d'une ZCE) lorsque l'équilibre s'est établi. On a :  $-qV_{int} = \Phi_{SC2} - \Phi_{SC1}$ . On remarque que les décalages des BC et BV entre les deux zones neutres ("loin") de l'interface)  $\Delta E_{C(n)}$  et  $\Delta E_{V(n)}$  sont différents de  $\Delta E_{C0}$  et  $\Delta E_{V0}$ ; ils peuvent d'ailleurs être exprimés en fonction des densités de porteurs libres  $n_{1,2}$  et des densités d'états équivalentes  $N_{C1,2}$  (pour  $\Delta E_{C(n)}$ ), et symétriquement pour  $\Delta E_{V(n)}$ .

La figure (X.8.b) montre le diagramme des bandes d'énergie au voisinage de l'interface. Suite à l'échange de charges qui se produit lorsque l'équilibre s'établit, les ZCE apparaissent dans chacun des SC, de part et d'autre de l'interface et se traduisent par des courbures des bandes d'énergie.

On peut calculer théoriquement les étendues  $x_1$  et  $x_2$  des ZCE ainsi que les ddp. internes  $V_{d1}$  et  $V_{d2}$  ( $V_{int} = V_d = V_{d1} + V_{d2}$ ) par résolution de l'équation de Poisson.

A l'interface (en x = 0), on constate que les niveaux  $E_C$  et  $E_V$  présentent des discontinuités :

$$\Delta E_{C} (discontinuité de E_{C} en x = 0) = E_{C2} (x = 0) - E_{C1} (x = 0)$$
  
= (E<sub>0</sub>- $\chi_{2}$ ) - (E<sub>0</sub>- $\chi_{1}$ )  
=  $\chi_{1} - \chi_{2} = \Delta E_{C0}$  (X.12)



**Figure X.8.** Bandes d'énergie dans l'hétérojonction à l'équilibre **a.** loin de l'interface. **b.** Au voisinage de l'interface - On remarquera en particulier les discontinuités de BC et BV en x = 0, égales à  $\Delta E_{C0}$  et  $\Delta E_{V0}$  de la figure (X.7).

Les discontinuités de  $E_C$  et  $E_V$  sont donc égales aux décalages des bandes  $\Delta E_{C0}$  et  $\Delta E_{V0}$  remarqués précédemment.

Ce résultat est valable si la densité d'états d'interface peut être négligée, ce qui n'est pas toujours le cas, mais qu'on s'efforce d'obtenir !

#### X.5.2. Applications : localisation et transport des porteurs

La propriété la plus intéressante est qu'une hétérojonction peut être utilisée pour contrôler la position (spatiale) des porteurs libres (ou d'un seul type de porteurs) en les obligeant à se situer et/ou à se placer dans une région bien définie (région dite "de confinement"). Ceci tient aux barrières de potentiel que verront les porteurs (et donc essentiellement aux décalages "offset" de bande  $\Delta E_{C,V0}$ , qui sont, de plus, généralement différentes pour les électrons et pour les trous.



**Figure X.9.** Les trois types d'hétérojonctions (à l'équilibre) d'après S.M. SZE "High Speed Electronic Devices", Wiley, New-York, 1990. Pour comprendre les schémas relatifs aux structures dopées, on doit considérer que les SC1 et 2 ont des dopages de même type (hétérojonction isotype) et que, comme c'est souvent le cas dans les matériaux III-V, les dopages réalisés amènent le niveau de Fermi très prés des bandes (ainsi la condition d'équilibre  $E_F =$  constante revient approximativement à aligner les bandes des porteurs majoritaires, "loin" de l'interface).
## Configuration des bandes et confinement de porteurs

On distingue en général trois types de raccordements de bandes pour les hétérojonctions, schématisés en figure (X.9) :

- Dans le *type I*, le gap le plus faible se positionne "à l'intérieur" du gap le plus large (c. à d. :  $E_{C1} < E_{C2}$  et  $E_{V1} > E_{V2}$ , si  $E_{G1} < E_{G2}$ ). Dans ce cas, on peut prévoir que les électrons (ou les trous) qui existent dans le SC2 auront tendance à passer dans SC1 (vers des énergies plus basses). Avec ce type d'hétérojonction, on peut prévoir qu'il sera facile d'injecter au moins un type de porteurs dans le SC à faible gap. Notons que si on parvient à y injecter les deux types de porteurs, on aura probablement des recombinaisons intenses (avec émission de lumière si les recombinaisons sont radiatives : c'est ce qui se passe dans des diodes électroluminescentes ou lasers à hétérojonction). Inversement il sera difficile, voire impossible, d'injecter des porteurs du SC1 (à faible gap) vers le SC2, à cause des barrières de potentiel à l'hétérojonction : HBT).
- Dans le *type II*, les deux bandes interdites sont décalées (ou "étagées" : E<sub>C1</sub> < E<sub>C2</sub>, et E<sub>V1</sub> < E<sub>V2</sub>) : les électrons auront tendance à s'accumuler (ou à rester) dans le SC1 et les trous dans le SC2.
- Dans une hétérojonction de *type III*, où la bande de conduction (ou de valence) reste constante et l'écart de bande interdite  $\Delta E_G$  se retrouve entièrement sur l'autre bande, le flux d'un des types de porteurs ne sera pas affecté tandis que l'autre sera fortement modifié. Cette configuration est aussi utilisée pour réaliser certains transistors bipolaires à hétérojonction.

La figure (X.9) montre aussi (comme indiqué au paragraphe précédent et sur la figure (X.8.b)), qu'au voisinage de l'interface, pour des structures dopées, existent des ZCE et des courbures de bandes (en plus des discontinuités  $\Delta E_C$  et  $\Delta E_V$ ). Ainsi apparaissent des zones désertées (par les porteurs majoritaires, notées "d" sur la figure (X.9), et associées à des barrières de potentiel pour ces porteurs) et des zones d'accumulation, correspondant à des puits de potentiel. La largeur de tels puits peut être relativement faible (quelques nm à 10 nm) et provoquer une quantification des niveaux d'énergie disponibles "dans" ce puits, avec une séparation des deux premiers niveaux de l'ordre de 10 à 30 meV. Cette quantification se retrouve dans la réalisation d'hétérostructures à puits quantiques, utilisées pour décaler la raie laser de GaAs de l'infra-rouge vers le rouge (puits GaAs entre deux couches AlGaAs), ou pour fabriquer des détecteurs infra-rouges. D'autres hétérostructures à couches très minces (et parfois multiples) servent à réaliser des structures à effet tunnel (et à effet tunnel "résonnant").

## Courant (ou contrôle de courant) dans une hétérojonction

Selon la façon dont on souhaite profiter de l'existence des barrières et des puits de potentiel, on utilise une hétérojonction :

Soit pour contrôler la concentration et le flux de porteurs (électrons) circulant parallèlement à l'interface (dans un puits de potentiel). L'hétérostructure est donc utilisée comme un transistor à effet de champ dont le contact de grille est pris sur le SC (dopé n) à grand gap (AlGaAs), alors que les électrons provenant de ce dopage vont circuler dans le puits de potentiel qui apparaît, à l'interface, dans le SC à faible gap (GaAs ou GaInAs), peu dopé ce qui permet aux électrons d'avoir une bonne mobilité (HEMT : High Electron Mobility Transistor, aussi appelé TEGFET : Two-dimensional

Electron Gas Field Effect Transistor puisque les électrons se déplacent dans le plan de l'interface).

- Soit pour maîtriser le flux (ou obtenir certaines propriétés spécifiques liées au flux) de porteurs <u>traversant</u> la structure (perpendiculairement à l'interface). Lorsque les couches semi-conductrices de l'hétérojonction ne sont pas trop fines, l'expression du courant traversant la structure s'obtiendra alors par une démarche voisine de celle du contact M-SC. Mais dans l'évaluation des diverses contributions au courant total, on tiendra compte des spécificités de l'hétérojonction (barrière de potentiel/décalage de bandes) : ainsi, pour la structure de la figure (X.8.b), on peut dire que :
  - Dans le SC1 (type p), les électrons qui seront injectés par le SC2 (type n) pourront se recombiner avec les trous et on aura ici un courant composé à la fois des flux de trous et d'électrons.
  - ▶ Dans le SC2, le courant sera exclusivement un courant d'électrons car ce SC est de type n, et les trous susceptibles de provenir de SC1 (type *p*) ne pourront pas être injectés dans le SC2 par suite de la forte barrière (pour les trous) associée à  $\Delta E_V$ .

Comme nous l'avons déjà signalé, c'est ce genre de propriété (empêcher l'injection d'un type de porteurs, ou favoriser cette injection) qui est utilisé dans les diodes ou transistors bipolaires à hétérojonction : citons par exemple pour les diodes les hétérojonctions AlGaAs/GaAs, et pour les transistors les hétérostructures (Emetteur/Base/Collecteur) : AlGaAs/GaAs/GaAs et Si/SiGe/Si.

Une hétérojonction peut également être utilisée pour effectuer une injection de porteurs (électrons) chauds : en effet, lors du passage de l'hétérojonction (d'un SC à large gap vers un SC à faible gap), un électron va acquérir un supplément d'énergie cinétique égal à  $\Delta Ec$  (le décalage des bandes de conduction). Dans une structure n-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/n-GaAs, on a (pour x < 0,45) :  $\Delta Ec \approx (1,05 x)$  eV, c. à d. pour  $x \approx 0,3$ , un supplément initial d'énergie supérieur à 0,3 eV (correspondant à l'énergie d'agitation thermique de l'électron à environ 3000 K =  $10 \times T_{amb}$ ). Ce principe est mis en oeuvre pour la réalisation de dispositifs à électrons chauds et à forte vitesse (sources microondes : dispositifs à effet Gunn à hétérojonction présentant d'excellents rendements).

Comme on le verra lors de l'étude des composants de l'optoélectronique, des diodes électroluminescentes et des diodes laser à SC sont réalisées à partir de double hétérostructures (par exemple du type p-AlGaAs/n (ou p) GaAs/n-AlGaAs), dont la couche centrale, dite "active" (celle du SC à faible gap) d'épaisseur 0,1 à 0,2  $\mu$ m est considérée comme relativement épaisse par rapport à celles utilisées dans les "laser à puits quantiques" (ou dans les super-réseaux). Ces lasers (figure (X.10)) comportent plusieurs puits quantiques (couches GaAs de 5 à 10 nm d'épaisseur, et "barrières" de 10 à 20 nm de AlGaAs où la proportion x = 0,2 d'Al lui confère une bande interdite intermédiaire entre GaAs et AlGaAs constituant la double hétérojonction des extrémités). La quantification des niveaux d'énergie dans les puits permet d'ajuster la longueur d'onde de l'effet laser, mais aussi de diminuer le courant de seuil de déclenchement et de réduire la sensibilité à la température.



Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As

**Figure X.10.** Laser à puits quantique constitué d'un système multicouches minces  $(GaAs/Al_{0,2}Ga_{0,8}As$ formant les puits quantiques où électrons et trous peuvent être confinés) et de la double hétérojonction avec  $Al_{0,4}Ga_{0,6}As$  (permettant également un confinement optique lié à la différence des indices de réfraction).

La largeur de la bande interdite de Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As évolue pour x < 0,45 (le SC reste à gap direct) selon :

 $E_G(eV) \approx 1,42 + 1,25x.$