



# Physique des semi-conducteurs

4<sup>e</sup> édition

Ecoles d'ingénieurs  
Master

DUNOD

**Christian Ngô**  
**Hélène Ngô**

# **Physique**

# **des semi-conducteurs**

**Cours et exercices corrigés**

**4<sup>e</sup> édition**

**DUNOD**

Illustration de couverture : © DJM-Photo – Fotolia.com

<p>Le pictogramme qui figure ci-contre mérite une explication. Son objet est d'alerter le lecteur sur la menace que représente pour l'avenir de l'écrit, particulièrement dans le domaine de l'édition technique et universitaire, le développement massif du photocopillage.</p> <p>Le Code de la propriété intellectuelle du 1<sup>er</sup> juillet 1992 interdit en effet expressément la photocopie à usage collectif sans autorisation des ayants droit. Or, cette pratique s'est généralisée dans les établissements</p>	<p>d'enseignement supérieur, provoquant une baisse brutale des achats de livres et de revues, au point que la possibilité même pour les auteurs de créer des œuvres nouvelles et de les faire éditer correctement est aujourd'hui menacée.</p> <p>Nous rappelons donc que toute reproduction, partielle ou totale, de la présente publication est interdite sans autorisation de l'auteur, de son éditeur ou du Centre français d'exploitation du droit de copie (CFC, 20, rue des Grands-Augustins, 75006 Paris).</p>
	

© Dunod, Paris, 1998, 2003, 2007, 2012  
ISBN 978-2-10-058343-0

Le Code de la propriété intellectuelle n'autorisant, aux termes de l'article L. 122-5, 2<sup>e</sup> et 3<sup>e</sup> al, d'une part, que les « copies ou reproductions strictement réservées à l'usage privé du copiste et non destinées à une utilisation collective » et, d'autre part, que les analyses et les courtes citations dans un but d'exemple et d'illustration, « toute représentation ou reproduction intégrale ou partielle faite sans le consentement de l'auteur ou de ses ayants droit ou ayants cause est illicite » (art. L. 122-4).

Cette représentation ou reproduction, par quelque procédé que ce soit, constituerait donc une contrefaçon sanctionnée par les articles L. 335-2 et suivants du Code de la propriété intellectuelle.

# Table des matières

<b>AVANT-PROPOS</b>	xi
<b>RAPPELS UTILES</b>	xiv
<b>CHAPITRE 1 • PHYSIQUE QUANTIQUE</b>	1
1.1 Dualité onde-corpuscule	2
1.2 Relation de de Broglie	3
1.3 Postulats	4
1.4 États stationnaires	6
1.5 Mesures simultanées d'observables	6
1.6 Relations d'incertitude	7
1.7 Nombres quantiques	8
1.8 Spin	8
1.9 Bosons et fermions	9
1.10 Quantique ou classique ?	9
1.11 États liés et états du continu	10
Exercices	15
Corrigés	16
<b>CHAPITRE 2 • PHYSIQUE STATISTIQUE</b>	17
2.1 Postulats	17
2.2 Entropie statistique	18
2.3 Travail, chaleur	20
2.4 Conditions d'équilibre	21
2.5 Ensembles	24
2.6 Théorème d'équipartition de l'énergie	27
2.7 Statistiques quantiques	27
2.8 Gaz parfait de Fermi	29
Exercices	33
Corrigés	34

<b>CHAPITRE 3 • STRUCTURE CRISTALLINE</b>	<b>39</b>
3.1 Le cristal idéal	39
3.2 Réseaux cristallins	40
3.3 Diffraction par un réseau cristallin	49
3.4 Défauts cristallins	54
Exercices	56
Corrigés	57
<b>CHAPITRE 4 • BANDES D'ÉNERGIE</b>	<b>59</b>
4.1 Approximations	59
4.2 Méthode des liaisons fortes	62
4.3 Symétries	65
4.4 Approche des liaisons faibles	67
4.5 Propriétés statiques des électrons	71
4.6 Schéma réduit de Brillouin	72
4.7 L'équation centrale	74
4.8 Surface de Fermi	75
4.9 Métaux, isolants, semi-conducteurs	76
4.10 De l'isolant au métal	79
Exercices	81
Corrigés	82
<b>CHAPITRE 5 • DYNAMIQUE DU RÉSEAU</b>	<b>83</b>
5.1 Vibrations du réseau	83
5.2 Phonons	87
5.3 Propriétés thermiques	88
Exercices	92
Corrigés	93
<b>CHAPITRE 6 • SEMI-CONDUCTEURS À L'ÉQUILIBRE</b>	<b>95</b>
6.1 Notion de trou	95
6.2 Gap	96
6.3 Masse effective	98
6.4 Structure des bandes d'énergie	102
6.5 Densité d'états	104
6.6 Densité d'électrons et de trous	105

6.7	Semi-conducteurs intrinsèques	107
6.8	Dopage	108
6.9	Semi-conducteurs extrinsèques	114
	Exercices	116
	Corrigés	117
<b>CHAPITRE 7 • DYNAMIQUE DES ÉLECTRONS</b>		119
7.1	Dérive dans un champ électrique	120
7.2	Réponse à un champ électrique	123
7.3	Diffusion des porteurs	126
7.4	Potentiel externe et bandes d'énergie	129
7.5	L'effet Hall	129
	Exercices	131
	Corrigés	133
<b>CHAPITRE 8 • DISPOSITIFS ÉLÉMENTAIRES (I)</b>		137
8.1	La jonction pn	137
8.2	Perturbations dues à la surface	144
8.3	La jonction métal-métal	147
8.4	La jonction métal-semi-conducteur	148
	Exercices	151
	Corrigés	153
<b>CHAPITRE 9 • DISPOSITIFS ÉLÉMENTAIRES (II)</b>		157
9.1	Le transistor bipolaire	157
9.2	La diode tunnel	161
9.3	Transistors à effet de champ	162
9.4	Structures MIS et MOS	166
9.5	Le transistor MOS	168
9.6	Hétérojonctions	172
	Exercices	174
	Corrigés	175
<b>CHAPITRE 10 • PROPRIÉTÉS OPTIQUES</b>		177
10.1	Absorption de photons	177
10.2	Émission spontanée de photons	185
10.3	Émission stimulée	187

Exercices	190
Corrigés	191
<b>CHAPITRE 11 • VERS L'ÉCHELLE NANOMÉTRIQUE</b>	<b>193</b>
11.1 Systèmes mésoscopiques	194
11.2 Puits, fils et boîtes quantiques	195
11.3 Densité de niveaux	196
11.4 Puits quantiques	197
11.5 Multipuits quantiques et superréseaux	199
11.6 Transmission résonante sous la barrière	200
11.7 Le blocage de Coulomb	201
11.8 Dispositifs à un électron	204
11.9 Effet Hall quantique	204
11.10 Spintronique	206
11.11 L'électronique moléculaire	208
11.12 La technologie	208
11.13 Conclusion	209
Exercices	210
Corrigés	210
<b>CHAPITRE 12 • DU NANOMONDE AUX APPLICATIONS</b>	<b>211</b>
12.1 La nano-électronique : pourquoi ?	212
12.2 Voir et manipuler l'infiniment petit	215
12.3 Nouvelles formes de carbone	217
12.4 À l'échelle du nanomètre, le monde change	219
12.5 Top-down ou bottom-up ?	221
12.6 La nanomédecine	225
12.7 Nanoparticules et santé	228
12.8 Nano-électronique et libertés individuelles	229
Exercices	230
Corrigés	230
<b>BIBLIOGRAPHIE</b>	<b>233</b>
<b>INDEX</b>	<b>235</b>

# Avant-propos

Les dispositifs électroniques à semi-conducteurs ont maintenant une importance économique et stratégique considérable pour le traitement de l'information et de la communication. Ils ont un rôle clef dans la réalisation et le fonctionnement de beaucoup de biens de consommation. Leur importance est née avec la découverte, en 1948, du transistor. Le développement de l'industrie électronique s'est par la suite accéléré avec, dans les années 1970, l'arrivée des circuits intégrés. Le silicium occupe la position dominante parmi les semi-conducteurs et cette situation devrait encore durer longtemps.

Les circuits intégrés concentrent, sur une faible surface, un nombre de plus en plus grand de transistors et leur puissance augmente sans cesse. Ils répondent à une demande du consommateur qui souhaite avoir de plus en plus de confort dans la vie courante en se débarrassant des tâches fastidieuses. Pour cela il faut des dispositifs de traitement de l'information de plus en plus puissants. Une simple carte de crédit contient environ 2 millions de transistors et une automobile actuelle embarque plus d'électronique que les premiers avions Airbus. Les circuits intégrés peuvent être fabriqués simultanément en grand nombre si bien que leur coût de production diminue considérablement alors que leurs performances augmentent. L'industrie micro-électronique est gouvernée par la nécessité de réaliser des composants électroniques (mémoires ou circuits intégrés) toujours plus rapides, plus petits et moins chers.

L'électronique a beaucoup évolué depuis la réalisation du premier transistor. En vingt-cinq ans les performances des microprocesseurs ont été multipliées par 25 000. Sur une surface inférieure à celle du premier transistor, on peut maintenant en mettre plus d'un million. Le prix d'un million de transistors était d'environ 75 000 € en 1973, soit le prix d'une maison. Il est descendu à 6 centimes d'euros en 2000 puis, en 2005, à seulement 0,5 centime d'euro. Alors que le premier microprocesseur d'INTEL, le 4004, contenait 2 300 transistors, le Pentium IV des années 2001 en contenait 55 millions, les premiers centrinos d'INTEL plus de 77 millions et le core duo plus de 150 millions sur une surface de moins de 100 mm<sup>2</sup>. Entre 1964 et la fin des années 1970 le nombre de transistors d'un circuit intégré doublait tous les ans. Depuis cette date, il ne double plus que tous les 18 mois ce qui reste une performance impressionnante. Cette observation,



connue sous le nom de loi de Moore, montre l'extraordinaire vitalité de l'électronique des semi-conducteurs.

L'intégration croissante des composants est en grande partie due à la possibilité de graver des motifs de plus en plus fins dans le silicium. La célèbre série de microprocesseurs 8086 (environ 29 000 transistors), développée par la société INTEL pour les premiers micro-ordinateurs PC, était réalisée avec une technologie dans laquelle on gravait le silicium avec une précision de 4  $\mu\text{m}$ . En 1982, le microprocesseur 80286 était fabriqué avec des règles de dessin de 2  $\mu\text{m}$ . Il fut suivi par les i386DX et i486Dx fabriqués, respectivement, avec une technologie de 1,2  $\mu\text{m}$  et 1  $\mu\text{m}$ . Le Pentium IV basse consommation des années 2000 utilisait une précision de gravure de 0,13  $\mu\text{m}$ . On est aujourd'hui descendu à des finesses de gravure de 65 nm. Les mémoires ont également connu une évolution impressionnante. La première mémoire DRAM (1970) ne faisait que 1 ko mais on atteignait une capacité de 4 ko en 1979. En 2001, on réalisait industriellement des DRAM de 512 ko. On en trouve maintenant qui ont des capacités de plusieurs dizaines de Go et l'on dépasse les 100 Go.

L'objectif de cet ouvrage est de présenter la physique des semi-conducteurs à des physiciens et des chimistes dont le niveau est celui d'un premier cycle universitaire ou équivalent. Il s'agit d'un cours d'initiation pour tous ceux qui veulent acquérir rapidement des bases élémentaires dans ce domaine. Il pourra être complété par la lecture d'ouvrages plus complets dont certains sont cités dans la bibliographie.

Les composants de l'électronique moderne sont, pour la grande majorité d'entre eux, réalisés à partir de semi-conducteurs cristallins. Leur fonctionnement est basé sur des phénomènes de la physique quantique et statistique. Ces sujets sont rappelés dans les deux premiers chapitres. Le troisième introduit la physique des cristaux, le chapitre 4 montre que l'arrangement périodique des atomes dans un cristal conduit à des bandes d'énergie qui gouvernent ses propriétés électriques et le chapitre 5 étudie les vibrations des atomes du cristal. Les propriétés électriques des semi-conducteurs sont gouvernées par celles des électrons les moins liés de l'édifice cristallin. Leurs propriétés statiques et dynamiques sont respectivement étudiées dans les chapitres 6 et 7. Les chapitres 8 et 9 abordent, de manière qualitative, la physique des composants électroniques élémentaires. Le chapitre 10 est consacré à l'interaction des électrons et des photons qui est à la base des composants optroniques. Le chapitre 11 introduit le domaine des systèmes de dimensions nanométriques qui préparent l'électronique du futur. En effet, l'évolution de l'industrie micro-électronique rencontre des défis technologiques et physiques nouveaux lorsque l'on descend à des dimensions inférieures à quelques dizaines de nanomètres. Elle devra les résoudre pour continuer à se développer mais elle pourrait aussi être ralentie avant pour des raisons économiques si les investissements deviennent trop grands pour être rentabilisés. Le dernier chapitre aborde le problème des nanotechnologies, des nanosystèmes et de la nano-électronique en essayant de réfléchir sur les applications futures, sur les enjeux ainsi que sur les

impacts que peuvent avoir ces technologies sur la société. À la fin de chacun des chapitres, des exercices corrigés sont proposés.

L'un d'entre-nous (C.N.) souhaite remercier le Laboratoire d'Electronique de Technologie et d'Instrumentation (LETI) du Commissariat à l'Energie Atomique (CEA) pour lui avoir fait découvrir le domaine passionnant de l'électronique moderne et de ses technologies. Il a bénéficié, au cours de quelques années passées au LETI, d'enrichissantes discussions avec de nombreux collègues qui sont vivement remerciés ici.

• **Notations** : les vecteurs sont notés à l'aide de caractères gras. Par exemple,  $\mathbf{A}$  est un vecteur de composantes ( $A_x$ ,  $A_y$  et  $A_z$ ). Toutefois, pour ne pas confondre le vecteur champ électrique et l'énergie, nous noterons ce vecteur avec une flèche ( $\vec{E}$ ).

# Rappels utiles

## Constantes physiques

Charge de l'électron	$-e = -1,602\,19 \times 10^{-19} \text{ C}$
Constante de Boltzmann	$k_B = 1,380\,664 \times 10^{-23} \text{ J/K}$
Constante de Planck	$\begin{cases} h = 6,626\,18 \times 10^{-34} \text{ Js} \\ \hbar = h/2\pi = 1,054\,590 \times 10^{-34} \text{ Js} \end{cases}$
Constante de structure fine	$\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c) = 1/137,0360$
Constante de Rydberg	$R_\infty = 1,097\,373\,20 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$
Constante des gaz parfaits	$R = \mathcal{N}k_B = 8,314\,41 \text{ JK}^{-1}\text{mol}^{-1}$
Masse de l'électron	$m = 9,109\,54 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Masse du neutron	$m_n = 1,674\,95 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Masse du proton	$m_p = 1,672\,65 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Nombre d'Avogadro	$\mathcal{N} = 6,022\,05 \times 10^{23}$
Perméabilité du vide	$\mu_0 = 1/\epsilon_0 c^2 = 4\pi 10^{-7} \text{ Hm}^{-1}$
Permittivité du vide	$\begin{cases} \epsilon_0 = 8,854 \times 10^{-12} \text{ Fm} \\ 1/(4\pi\epsilon_0) = 8,988 \times 10^9 \text{ Nm}^2\text{C}^{-2} \end{cases}$
Rayon de Bohr	$a_1 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/(me^2) = 52,9177 \text{ pm}$
Vitesse de la lumière dans le vide	$c = 2,997\,924\,58 \times 10^8 \text{ m/s}$

## Préfixes

deca	→	$10^1$	symbole	da	deci	→	$10^{-1}$	symbole	d
hecto	→	$10^2$	symbole	h	centi	→	$10^{-2}$	symbole	c
kilo	→	$10^3$	symbole	k	milli	→	$10^{-3}$	symbole	m
mega	→	$10^6$	symbole	M	micro	→	$10^{-6}$	symbole	$\mu$
giga	→	$10^9$	symbole	G	nano	→	$10^{-9}$	symbole	n
tera	→	$10^{12}$	symbole	T	pico	→	$10^{-12}$	symbole	p
pecta	→	$10^{15}$	symbole	P	femto	→	$10^{-15}$	symbole	f
exa	→	$10^{18}$	symbole	E	atto	→	$10^{-18}$	symbole	a

## Unités particulières

$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$        $1 \text{ fermi} = 1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$        $1 \text{ eV} = 1,602190 \times 10^{-19} \text{ J}$   
 $1 \text{ cal} = 4,1855 \text{ J}$  et  $1 \text{ Cal} = 1 \text{ kcal} = 1\,000 \text{ cal}$

## Conversions

$$E = h\nu, \lambda = c/\nu, \sigma = 1/\lambda, E = k_B T$$

$$1 \text{ eV} \rightarrow 8\,065,48 \text{ cm}^{-1} \rightarrow 2,417971 \times 10^{14} \text{ Hz} \rightarrow 1\,239,852 \text{ nm} \rightarrow 11\,604,5 \text{ K}$$

$$1 \text{ eV} = 23\,045 \text{ kcal/mol}$$

## Chapitre 1

---

# Physique quantique

La matière est composée d'atomes ou de molécules qui obéissent à des lois physiques souvent différentes de celles auxquelles nous sommes accoutumés dans le monde macroscopique. Cela ne veut pas dire que les lois fondamentales de la physique ne sont pas les mêmes pour les atomes et pour les objets macroscopiques. En effet, certains effets de ces lois physiques peuvent apparaître prépondérants à une échelle alors qu'ils ont peu d'importance à l'autre. On s'est ainsi aperçu, au début du vingtième siècle, que la mécanique classique, qui avait été développée pour décrire le mouvement d'objets macroscopiques, était incapable de décrire de manière satisfaisante certains phénomènes comme le rayonnement du corps noir, l'effet photoélectrique ou l'effet Compton. Il a fallu pour cela introduire une nouvelle théorie, la *mécanique quantique*, pour comprendre et expliquer le comportement d'objets microscopiques comme les atomes, les molécules ou les noyaux ainsi que leurs assemblages en entités plus complexes. La mécanique classique, qui permet de très bien décrire l'évolution des objets macroscopiques comme les planètes ou la chute des corps, en est une limite, lorsque certaines conditions sont satisfaites<sup>1</sup>.

Un phénomène est qualifié de *quantique* s'il ne peut être expliqué que par la mécanique quantique. Il est qualifié de *classique* s'il peut être expliqué dans le cadre d'une théorie classique (mécanique, hydrodynamique, électromagnétisme, *etc.*). Bien que les phénomènes classiques puissent aussi être interprétés dans le cadre d'une théorie quantique, on ne les qualifie jamais, dans la pratique, de phénomènes quantiques. Nous nous conformerons à cet usage et appellerons *effet quantique* tout phénomène

---

1. Nous renvoyons le lecteur à nos ouvrages de *Physique quantique* et *Physique statistique*, édités chez Dunod, pour une introduction à ces sujets. Dans la suite, nous nous référerons à ces livres en utilisant les sigles MQ et PS, respectivement.

ne pouvant pas être interprété dans un cadre dit classique. Ainsi, selon les conditions, une particule pourra avoir un comportement classique ou quantique.

## 1.1 DUALITÉ ONDE-CORPUSCULE

La physique classique distingue les *particules*, qui correspondent à une densité d'énergie localisée dans l'espace, et les *ondes* qui correspondent à une délocalisation de l'énergie. Nous appellerons *corpuscules* les objets qui se comportent comme des particules classiques et utiliserons le terme de *particule* pour un objet qui peut être soit un corpuscule soit une onde.

Les corpuscules obéissent aux équations de la mécanique classique. Les ondes obéissent à des équations aux dérivées partielles avec des conditions aux limites qui dépendent du problème considéré. On obtient alors des solutions où toutes les énergies ne sont pas permises. Ainsi, le pincement d'une corde de guitare ne donne pas un spectre continu de fréquences.

L'évolution des corpuscules dans une théorie classique est *déterministe*. Si l'on connaît l'état d'un système à un temps  $t_0$ , ainsi que les caractéristiques des interactions, on peut, en principe, calculer l'état du système à un temps  $t$  ultérieur et définir la notion de *trajectoire*.

Les ondes se comportent parfois, lors de l'interaction avec la matière, comme des corpuscules. De même, des corpuscules se comportent, dans certaines conditions, comme des ondes. Ainsi, l'effet photoélectrique et l'effet Compton sont une manifestation de cet aspect corpusculaire de la lumière. D'autre part, le comportement ondulatoire des corpuscules est observé lors de la diffraction d'électrons, de neutrons, *etc.* sur des cristaux.

De nombreuses expériences montrent la nature ambivalente de la matière et du rayonnement. Les ondes électromagnétiques peuvent se comporter, lors de l'interaction avec la matière, comme des corpuscules (effet Compton), les corpuscules peuvent se comporter comme des ondes (diffraction des électrons). Cette dualité onde-corpuscule existe toujours au niveau microscopique. On peut observer l'un ou l'autre de ces deux aspects mais jamais les deux en même temps. La mécanique quantique résout cette apparente contradiction en disant qu'une particule n'est ni une onde ni un corpuscule mais qu'elle peut avoir l'un ou l'autre de ces comportements selon les conditions dans lesquelles elle se trouve.

Pour décrire un système classique, il suffit de connaître ses variables dynamiques : les positions et les vitesses de chaque particule le constituant. Si des charges électriques interviennent, il faut, en outre, connaître le champ électrique et le champ magnétique en tout point de l'espace. Les grandeurs physiques que l'on peut mesurer sont fonctions des quantités précédentes et le calcul différentiel et intégral est le cadre mathématique parfait pour élaborer les théories correspondantes.

Les systèmes quantiques ne peuvent pas être décrits ainsi. La notion de trajectoire doit être abandonnée au profit de celle de *fonction d'onde* qui contient *toute* l'information sur le système. Les quantités physiques ne sont plus représentées par des fonctions, comme dans les théories classiques, mais par des opérateurs mathématiques et la notion de mesure prend une importance particulière. En effet, le résultat d'une mesure ne peut être qu'une valeur propre associée à ces opérateurs.

## 1.2 RELATION DE DE BROGLIE

On peut associer à chaque particule une onde dont la longueur d'onde,  $\lambda$ , est donnée par la formule de de Broglie :

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad \text{ou} \quad \mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \quad (1.1)$$

où  $p$  est le module de l'impulsion  $\mathbf{p}$ . La quantité  $\mathbf{k}$  est le vecteur d'onde et  $h$  la constante de Planck. En physique quantique on utilise  $\hbar = h/2\pi$  plutôt que la constante de Planck. La fréquence de l'onde de matière associée à la particule,  $\nu$ , ainsi que sa pulsation  $\omega$ , sont reliées à l'énergie de la particule  $E$ , par la relation :

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

Insistons bien sur le fait que  $E$  est l'*énergie totale* de la particule ; elle inclut son énergie de masse au repos. C'est donc la somme de l'énergie cinétique ( $T$ ) de la particule et de son énergie de masse au repos ( $m_0c^2$ , où  $m_0$  est la masse au repos et  $c$  la vitesse de la lumière ; on a, par exemple  $m_0c^2 = 511 \text{ keV}$  pour l'électron). En mécanique relativiste, la relation entre l'énergie totale et l'impulsion est donnée par la relation :

$$E^2 = p^2c^2 + m_0c^4$$

Celle-ci donne, dans la limite classique où la vitesse  $v \ll c$ , la relation bien connue entre l'énergie cinétique et l'impulsion :  $T = p^2/2m_0$ . Pour un photon, pour lequel  $m_0 = 0$ , on a  $p = E/c$ . Les relations de de Broglie conduisent ainsi aux relations connues en électromagnétisme :

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad \text{et} \quad \lambda = \frac{c}{\nu} \quad \text{pour les photons.}$$

Il faut garder en mémoire que la relation  $\lambda = c/\nu$  n'est pas valable pour une particule dont la masse au repos n'est pas nulle.

La longueur d'onde associée à une particule est un paramètre important pour savoir si celle-ci se comporte comme un corpuscule ou comme une onde. En effet, lorsque la longueur d'onde est grande, ou du même ordre de grandeur que les dimensions caractéristiques du problème que l'on étudie, la particule se comporte comme une onde. Si,

au contraire, comme c'est le cas pour un objet classique, elle est très petite devant ces dimensions caractéristiques, la particule se comporte toujours comme un corpuscule. Une particule ne peut se comporter comme un corpuscule *et* comme une onde. La question est, bien sûr, d'évaluer convenablement les dimensions caractéristiques du système.

Pour résumer, on peut dire que l'aspect corpusculaire, que l'on observe lorsque la longueur d'onde associée à la particule est petite comparée à ses dimensions ou aux dimensions de l'instrument de mesure, est très bien décrit dans le cadre de la mécanique classique non relativiste (sauf si la vitesse de la particule est proche de celle de la lumière). L'aspect ondulatoire se manifeste lorsque la longueur d'onde associée à la particule n'est plus négligeable comparée aux dimensions caractéristiques du problème.

## 1.3 POSTULATS

Toute théorie est construite à partir de postulats dont la validité dépend du bon accord avec l'expérience. La validité de la mécanique quantique a été vérifiée dans de nombreuses expériences et par ses effets directs ou indirects.

La description classique d'une particule se fait en termes des coordonnées de sa position et de sa vitesse. En mécanique quantique, il faut substituer à ces notions celle de *fonction d'onde et d'opérateurs*. La fonction d'onde contient toute l'information sur la particule, les opérateurs sont eux associés aux mesures que l'on peut faire sur celle-ci. Les six variables qui caractérisent l'état d'une particule classique (position et vitesse) sont remplacées par une seule fonction dont il faut connaître la valeur en tout point de l'espace. Les quantités physiques de la mécanique classique, fonctions des variables dynamiques (positions et impulsions), sont remplacées par des opérateurs hermitiques.

### 1.3.1 Postulat 1

Le premier postulat dit que l'état d'un système physique est complètement défini à tout instant  $t$  par la connaissance de son vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$ . Ce vecteur est défini dans l'espace de Hilbert qui caractérise le problème. Pour résoudre un problème de façon quantitative, il faut définir un référentiel et utiliser les composantes du vecteur d'état dans celui-ci. Celles-ci peuvent prendre des valeurs différentes selon le choix des vecteurs de base et l'on appelle cela une *représentation*. Plusieurs sont possibles et l'on choisit habituellement celle qui est la plus commode pour résoudre le problème posé. L'une d'entre-elles est particulièrement utilisée, c'est la *représentation coordonnées*. Cette représentation constitue la *mécanique ondulatoire* et  $|\psi(t)\rangle$  devient, dans cette représentation, une fonction d'onde  $\psi(\mathbf{r}, t)$  qui dépend de la position  $\mathbf{r}$  et du temps  $t$ .

### 1.3.2 Postulat 2

La mesure fait le lien entre l'observateur et le système. À la différence de la mécanique classique, toute mesure sur un système quantique perturbe celui-ci de manière incontrôlée. Le deuxième postulat associe à toute grandeur physique  $\mathcal{A}$  un opérateur hermitique  $\hat{A}$ , appelé *observable*. Le résultat d'une mesure de  $\mathcal{A}$  ne peut conduire qu'à une valeur propre de l'opérateur  $\hat{A}$ . Immédiatement après la mesure  $|\psi(t)\rangle$ , le vecteur d'état du système, est modifié : il est réduit à sa projection sur le sous-espace propre associé à la valeur propre mesurée.

Comme le résultat d'une mesure est toujours un nombre réel, l'opérateur  $\hat{A}$ , qui représente la quantité physique  $\mathcal{A}$ , est hermitique car les valeurs propres d'un tel opérateur sont toujours réelles.

### 1.3.3 Postulat 3

Le troisième postulat dit que l'évolution au cours du temps du vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$  est gouvernée par l'équation de Schrödinger dépendant du temps :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad (1.2)$$

où  $\hat{H}$  est l'opérateur hamiltonien (correspondant à l'énergie) du système. Cette équation étant linéaire, la combinaison linéaire de deux solutions est aussi une solution : c'est le *principe de superposition*.

### 1.3.4 Postulat 4

Le hamiltonien classique est l'énergie du système exprimée en fonction des coordonnées et des impulsions des particules qui le compose. Le quatrième postulat indique comment construire  $\hat{H}$  ainsi que les opérateurs quantiques. Les opérateurs  $\hat{x}$ ,  $\hat{y}$ ,  $\hat{z}$  sont obtenus par la substitution  $\hat{x} = x$ ,  $\hat{y} = y$ ,  $\hat{z} = z$  et les opérateurs  $\hat{p}_x$ ,  $\hat{p}_y$ ,  $\hat{p}_z$  par  $\hat{p}_x = -i\hbar \partial/\partial x$ ,  $\hat{p}_y = -i\hbar \partial/\partial y$  et  $\hat{p}_z = -i\hbar \partial/\partial z$ .

En représentation coordonnées, le hamiltonien d'une particule de masse  $m$  plongée dans un potentiel  $V(\mathbf{r}) = V(x, y, z)$  est obtenue à partir de l'expression classique  $H = \mathbf{p}^2/2m + V(\mathbf{r})$ . On obtient, en utilisant le postulat 4 :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x, y, z) \quad (1.3)$$

où  $\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$  est le laplacien en coordonnées cartésiennes. La représentation coordonnées de l'équation de Schrödinger dépendant du temps s'écrit alors :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.4)$$



La quantité  $\psi(\mathbf{r}, t)$  est une fonction complexe. Pour certaines valeurs du temps  $t$ , elle peut être réelle ou imaginaire pure. La fonction d'onde  $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(x, y, z, t)$  contient toute l'information sur le système. Elle permet d'en calculer toutes les propriétés, notamment l'énergie, et se substitue à la connaissance des variables  $\mathbf{r}$  et  $\mathbf{p}$  de la mécanique classique. Le carré du module de la fonction d'onde,  $|\psi|^2 = \psi^* \psi$ , est proportionnel à la densité de probabilité de présence de la particule au point  $\mathbf{r}$ .

## 1.4 ÉTATS STATIONNAIRES

L'énergie totale,  $E$ , joue un rôle particulier en mécanique classique et en mécanique quantique<sup>2</sup>. En effet, c'est une constante du mouvement pour un système isolé. Si le système est stable et isolé, elle reste constante. On dit alors que le système est dans un *état stationnaire*. Dans ce cas  $E$  est une valeur propre du hamiltonien et l'on doit avoir, puisque  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$  est l'opérateur associé à l'énergie :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = E \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.5)$$

Lorsque l'énergie  $E$  est constante, on obtient  $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, 0) \exp(-iEt/\hbar)$  qui donne  $\psi(\mathbf{r}, t)$  en fonction de la fonction d'onde initiale  $\psi(\mathbf{r}, 0) \equiv \psi(\mathbf{r})$ . Si nous reportons cette solution dans (1.4), on obtient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (1.6)$$

Cette équation différentielle est appelée *équation de Schrödinger indépendante du temps* (on l'appelle aussi souvent, par abus de langage, équation de Schrödinger tout court). Sa résolution donne la fonction d'onde au temps  $t = 0$  et les niveaux d'énergie. Pour une particule dans un puits de potentiel, il n'existe des solutions que pour certaines valeurs de l'énergie : elle est *quantifiée*.

## 1.5 MESURES SIMULTANÉES D'OBSERVABLES

Abordons maintenant le problème important de la mesure simultanée de deux quantités physiques  $A$  et  $B$  auxquelles sont associées les observables  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$ . Contrairement à la mécanique classique, on ne peut pas mesurer simultanément ces deux quantités avec toute la précision possible.

En effet, après la mesure, le système doit être dans l'état propre associé à la valeur propre qui est le résultat de la mesure. Pour deux mesures simultanées, il doit donc

---

2. Nous supposons ici le système non relativiste. L'énergie totale est alors définie comme la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle.

être dans un état propre commun aux deux opérateurs  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$ . Or, mathématiquement, deux opérateurs  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  ne peuvent avoir des vecteurs propres communs que s'ils commutent, *i.e.* si leur commutateur  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$ . Ceci n'est pas toujours possible et l'on ne peut pas toujours mesurer simultanément deux quantités physiques. C'est en particulier le cas de la position  $x$  d'une particule et de la composante  $p_x$  de son impulsion suivant  $x$ . En effet le commutateur  $[\hat{x}, \hat{p}_x] \neq 0$ . On ne peut donc mesurer simultanément les deux quantités physiques  $\mathcal{A}$  et  $\mathcal{B}$  que si  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0^3$ .

## 1.6 RELATIONS D'INCERTITUDE

La mesure simultanée de la position  $x$  et de l'impulsion associée  $p_x$  d'une particule n'est pas possible avec toute la précision possible pour un système quantique et la notion de trajectoire n'a pas de sens. Cela constitue un des *principes d'incertitude* de Heisenberg. Si  $\Delta x$  est l'incertitude<sup>4</sup> sur la coordonnée  $x$ , et  $\Delta p_x$  celle sur la composante de l'impulsion  $p_x$ , le principe d'incertitude de Heisenberg s'exprime sous la forme :

$$\Delta x \times \Delta p_x \gtrsim \hbar \quad (1.7)$$

Cette inégalité doit être prise au sens large. Elle signifie que le premier membre doit toujours être supérieur à une quantité de l'ordre de  $\hbar$ . Pour un système classique, les incertitudes sur  $x$  et  $p_x$  sont telles que l'inégalité de Heisenberg est toujours satisfaite.

La relation (1.7) montre que si l'on connaît exactement la position d'une particule, on ne connaît pas son impulsion et réciproquement. Appliquée à une particule confinée par un potentiel dans une région finie de l'espace, nous voyons que  $\Delta p_x \neq 0$  signifie que, même dans l'état d'énergie le plus bas, celle-ci est en mouvement. Cette énergie minimale, appelée *énergie de point zéro*, est si faible pour un système classique que l'on ne peut s'en rendre compte.

Il existe une relation d'incertitude similaire entre le temps et l'énergie mais sa signification est différente car le temps n'est pas une quantité physique mesurable en mécanique quantique, mais un paramètre. On mesure une différence de temps mais pas le temps lui-même. Cette relation s'énonce :

$$\Delta E \times \Delta t \gtrsim \hbar \quad (1.8)$$

Si l'énergie d'un système est bien déterminée, il est infiniment stable. Si un système a une durée de vie  $\Delta t$ , son énergie ne peut être connue à mieux que  $\Delta E \approx \hbar / \Delta t$ . On

3. Il existe des opérateurs classiques qui ne commutent pas. C'est l'exemple des opérateurs  $\hat{A} = \ll \text{peindre un objet en rouge} \gg$  et  $\hat{B} = \ll \text{peindre un objet en bleu} \gg$ . On a bien  $\hat{A} \times \hat{B} \neq \hat{B} \times \hat{A}$ , puisque dans un cas l'objet sera rouge et dans l'autre bleu.

4. Par incertitude sur  $x$ , nous entendons une grandeur reliée aux fluctuations de la distribution de probabilité de la variable  $x$ , par exemple l'écart type de cette distribution.

peut donc attribuer à un niveau d'énergie une largeur de l'ordre de  $\Delta E$  déduite de son temps de vie. C'est ce que l'on appelle la *largeur naturelle* du niveau qui est d'autant plus grande que le système a une durée de vie plus courte.

## 1.7 NOMBRES QUANTIQUES

La fonction d'onde d'une particule contient toute l'information sur le système. La résolution de l'équation de Schrödinger permet très souvent, en utilisant les symétries du problème, de faire apparaître une factorisation de la fonction d'onde en plusieurs fonctions de variables distinctes qui forment une famille caractérisée par un ou plusieurs indices. Si ces indices prennent des valeurs discrètes, ils sont qualifiés de *nombres quantiques*. On peut disposer d'un ensemble de nombres quantiques permettant de définir de manière unique un état quantique. Sa donnée est alors équivalente à celle de la fonction d'onde pour définir de manière univoque un état quantique.

La recherche d'un ensemble complet d'observables qui commutent est un problème important tout comme, dans l'espace ordinaire, il est important d'avoir un ensemble de vecteurs indépendants sur lesquels développer tout vecteur. Ceci conduit donc à la notion d'ensemble complet de nombres quantiques qui permettent de définir de manière unique un état quantique. Il est équivalent de donner la fonction d'onde ou cet ensemble complet de nombres quantiques pour définir de manière univoque un état quantique. Pour cette raison, on caractérise souvent un état quantique par ses nombres quantiques plutôt que par sa fonction d'onde.

## 1.8 SPIN

Un degré de liberté associé à une particule est *interne ou intrinsèque* s'il est indépendant de la position spatiale de celle-ci. Les particules élémentaires possèdent des degrés de liberté internes. Le *spin* en est un qui n'a pas d'équivalent classique : c'est une propriété de nature purement quantique.

Toutes les particules (électrons, protons, neutrons, atomes, *etc.*) ont un spin. Le nombre quantique  $s$  associé ne peut prendre que des valeurs entières ou demi-entières  $1/2, 1, 3/2, 2, \dots$ . La longueur du carré du spin d'une particule de spin  $s$  vaut  $s(s+1)\hbar^2$  et sa projection sur l'axe  $Oz$  ne peut prendre que  $2s+1$  valeurs  $m_s\hbar$  allant de  $-s\hbar$  à  $+s\hbar$  par saut d'une unité. Pour définir complètement l'état de spin d'une particule, il faut connaître 2 quantités, son spin  $s$  et le nombre quantique associé à sa projection  $m_s$ . On a donc *deux degrés de liberté*. Lorsque l'on travaille sur des particules de même nature, le spin est le même pour toutes et on l'oublie souvent dans l'énumération des degrés de liberté pour ne considérer que le nombre quantique associé à sa projection,  $m_s$ . Le spin de l'électron, comme du proton ou du neutron, vaut  $s = 1/2$  et les valeurs des projections sont égales à  $\pm\hbar/2$ .

Une particule de spin  $s$  a  $2s + 1$  projections possibles sur un axe donné sauf le photon qui a un spin  $s = 1$  et une masse nulle. La mécanique quantique relativiste montre que le spin du photon n'a que deux projections possibles  $m_s \hbar = \pm \hbar$  qui correspondent aux 2 états de polarisation transverse de la lumière (la polarisation longitudinale est interdite pour des photons réels).

## 1.9 BOSONS ET FERMIONS

La plupart des objets sont discernables au niveau macroscopique. Au niveau microscopique toutes les particules de même nature sont indiscernables. Selon la valeur de leur spin  $s$  (exprimé en unités  $\hbar$ ), les particules appartiennent à deux familles différentes : les *bosons* pour lesquels  $s$  est entier, et les *fermions* où  $s$  est demi-entier. Par exemple, l'électron, qui a un spin égal à  $\frac{1}{2}$ , est un fermion alors que le photon, qui a un spin égal à 1, est un boson. Les fermions et les bosons ont les propriétés suivantes :

- La fonction d'onde d'un système constitué de plusieurs fermions est *antisymétrique* par rapport à l'échange de particules. Cette propriété implique que deux particules ne peuvent pas être dans le même état quantique. C'est ce que l'on appelle le *principe d'exclusion de Pauli*. On dit que les fermions obéissent à la *statistique de Fermi-Dirac*.
- La fonction d'onde d'un système de bosons doit être *symétrique* par rapport à l'échange de deux particules et plusieurs bosons peuvent se trouver dans la même configuration quantique. Ils obéissent à la *statistique de Bose-Einstein*.

## 1.10 QUANTIQUE OU CLASSIQUE ?

La physique classique permet, la plupart du temps, de décrire correctement les phénomènes macroscopiques. Elle permet aussi, dans certain cas, de décrire des phénomènes à l'échelle microscopique. Lorsque l'on peut utiliser une image classique, il n'y a aucun avantage à utiliser la mécanique quantique car, dans la pratique, le problème est en général plus difficile à résoudre dans le cadre de cette théorie. Il existe néanmoins des phénomènes qui ne peuvent pas être compris dans le cadre d'une théorie classique. Il faut alors utiliser la mécanique quantique. Si l'on veut étudier un problème donné, il est important de savoir s'il est nécessaire ou non d'utiliser la mécanique quantique. A ce sujet la distinction macroscopique-microscopique n'est pas toujours suffisante. En effet, si certains phénomènes du monde microscopique peuvent être interprétés grâce à la physique classique, il existe des phénomènes macroscopiques qui ne peuvent l'être que dans un cadre quantique (la supraconductivité en est un exemple).

La constante de Planck,  $\hbar = h/2\pi$ , joue un rôle important dans ces considérations. Elle a pour dimension :  $[\hbar] = [M][L^2][T^{-1}]$  où  $M$ ,  $L$  et  $T$  sont, respectivement, les dimensions associées à une masse, à une longueur et au temps. La

dimension de  $\hbar$  (J×s) correspond à une quantité que l'on appelle l'*action*. C'est aussi la dimension du produit d'un travail par un temps ou celle d'une quantité de mouvement par une longueur, *i.e.* d'un moment cinétique. Pour tout problème physique, on peut évaluer une quantité ayant cette dimension. Si le résultat correspond à quelques multiples de  $\hbar$  cela signifie que les effets quantiques sont importants et qu'il faut absolument utiliser la mécanique quantique. Si l'on trouve au contraire une valeur qui est un très grand nombre de fois supérieur à  $\hbar$ , les effets quantiques deviennent négligeables. Une théorie classique s'applique alors très bien au problème considéré.

On peut également évaluer la longueur d'onde  $\lambda$  associée au système. Si elle est grande, ou du même ordre de grandeur que les dimensions caractéristiques du problème, les effets quantiques sont importants. Si elle est au contraire très petite par rapport à ces dimensions caractéristiques, la physique classique est une excellente approximation. On observe également un comportement classique lorsque les nombres quantiques caractérisant le système sont grands par rapport à l'unité.

Il existe une situation intermédiaire dans laquelle on a une transition du phénomène purement quantique au phénomène classique ; c'est la région semi-classique dans laquelle on a un comportement fondamentalement classique du système modifié par quelques effets de nature purement quantique. Ce domaine est intéressant car on le rencontre dans de nombreux cas.

On a souvent tendance à penser que les phénomènes quantiques se manifestent lorsqu'apparaissent les aspects ondulatoires. Ceci provient de ce que l'on considère habituellement des particules dont le comportement classique est celui d'un corpuscule. Les phénomènes quantiques apparaissent lorsque le corpuscule présente des phénomènes de nature ondulatoire. Si, au lieu d'un corpuscule, nous considérons une onde, comme une onde électromagnétique par exemple, nous dirons que les phénomènes quantiques apparaissent lorsqu'elle présente des aspects corpusculaires (l'effet photo-électrique et la diffusion Compton en sont des exemples). Ces derniers se produisent lors de l'interaction de l'onde avec la matière.

## 1.11 ÉTATS LIÉS ET ÉTATS DU CONTINU

Les états d'énergie accessibles à une particule de masse  $m$  soumise à un potentiel  $V(\mathbf{r})$  appartiennent à deux catégories distinctes : les *états liés* ou les *états non liés* appelés aussi *états du continu*.

- 1) Lorsque la particule reste confinée dans une région finie de l'espace, on dit qu'elle est dans un *état lié*. La probabilité de la trouver à l'infini est nulle. Les valeurs de son énergie sont *quantifiées* et son spectre en énergie est *discret* (sections 1.10.1 à 1.10.3).

- 2) S'il n'existe pas de force confinant la particule, elle peut explorer tout l'espace. On dit alors que la particule se trouve dans un *état non lié*. Dans ce cas, son spectre en énergie est *continu* (sections 1.10.4 à 1.10.6).

### 1.11.1 Particule libre dans une boîte cubique

Nous utiliserons souvent un système formé d'une particule libre de masse  $m$  placée dans une boîte cubique de côté  $L$ . L'énergie potentielle est nulle à l'intérieur de la boîte et infiniment répulsive à l'extérieur de manière à confiner la particule à l'intérieur du cube. L'énergie de la particule, qui est purement cinétique dans ce cas, ne peut pas être quelconque. Seules certaines valeurs sont permises par la mécanique quantique. Elles sont données par l'expression (cf. PS, annexe A.6) :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n_x n_y n_z} &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = \epsilon_0 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \\ \text{avec} \quad \epsilon_0 &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \end{aligned} \quad (1.9)$$

où  $n_x$ ,  $n_y$  et  $n_z$  sont des entiers strictement positifs. Ce sont les nombres quantiques associés à chacune des directions de l'espace :  $x$ ,  $y$  et  $z$ . L'état fondamental correspond à  $n_x = n_y = n_z = 1$  et son énergie vaut  $\varepsilon_{111} = 3\epsilon_0$ . Il n'est pas dégénéré, c'est à dire qu'il est unique. Le premier état excité peut être construit de 3 manières différentes qui conduisent à la même valeur de l'énergie  $\varepsilon_{211} = \varepsilon_{121} = \varepsilon_{112} = 6\epsilon_0$ . La dégénérescence du premier état excité, *i.e.* le nombre d'états quantiques ayant la même valeur de l'énergie, est égale à trois (il y a 3 états quantiques différents pour une même valeur de l'énergie).

### 1.11.2 L'oscillateur harmonique à une dimension

La vibration d'un corps, suspendu à un ressort, autour de sa position d'équilibre est un exemple d'oscillateur harmonique classique. Supposons que ce corps ait une masse  $m$  et qu'il ne puisse se déplacer que dans une seule direction  $x$ . Nous supposons que la position d'équilibre correspond à  $x = 0$ . Ce système se comporte comme un oscillateur harmonique si son énergie potentielle,  $\mathcal{U}$ , est de la forme :

$$\mathcal{U} = \frac{1}{2} K x^2$$

où  $K$  est une constante. Si tel est le cas, le corps de masse  $m$  est soumis à une force de rappel égale à  $-\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x} = -Kx$ , et l'équation du mouvement s'écrit :

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -Kx$$

où  $t$  désigne le temps. La solution de cette équation est une sinusoïde dont la pulsation  $\omega$  est donnée par :  $\omega = \sqrt{K/m}$ . Le système oscille autour de sa position d'équilibre avec la pulsation  $\omega$ , *i.e.* avec une fréquence  $\nu = \omega/2\pi$ . Classiquement, toutes les valeurs positives de l'énergie sont permises.

Il existe des systèmes microscopiques dont l'énergie potentielle est une forme quadratique des coordonnées. Un exemple très simple est celui de la molécule d'hydrogène dont les deux atomes peuvent osciller le long de l'axe de symétrie de la molécule. La description correcte de ces systèmes requiert la mécanique quantique. Cette théorie montre que les niveaux d'énergie, donc les pulsations, sont quantifiées. Dans le cas d'un oscillateur harmonique à une dimension, les niveaux d'énergie sont donnés par :

$$\varepsilon_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

où  $n$  est un entier positif ou nul. C'est le nombre quantique associé à un oscillateur à une dimension. Les niveaux d'énergie ne sont pas dégénérés. L'état fondamental correspond à  $n = 0$  et son énergie est égale à  $\varepsilon_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$ . L'oscillateur est en mouvement, même dans son état fondamental, puisque son énergie totale (cinétique plus potentielle) n'est pas nulle. Ceci est différent de la mécanique classique où l'état d'énergie le plus bas correspond à une configuration dans laquelle le ressort est au repos.

Le fait que l'énergie totale d'un oscillateur harmonique ne puisse pas être nulle dans son état fondamental peut être interprété grâce au principe d'incertitude de Heisenberg : il n'est pas possible de mesurer simultanément la position  $x$  et l'impulsion  $p_x$  d'une particule. En effet, on doit toujours avoir l'inégalité :

$$\Delta x \times \Delta p_x \gtrsim \hbar$$

où  $\Delta x$  et  $\Delta p_x$  sont respectivement les largeurs des distributions de probabilité en  $x$  et  $p_x$ . Comme la forme de l'énergie potentielle oblige le système à rester dans une portion finie de l'espace, on a  $\Delta x \neq 0$ , positif. Il s'ensuit que  $\Delta p_x \gtrsim \hbar / \Delta x$ . Le système est donc toujours en mouvement.

### 1.11.3 L'atome d'hydrogène

L'atome d'hydrogène est constitué d'un proton et d'un électron qui interagissent par l'intermédiaire d'une force coulombienne attractive. Comme le proton est 1 836 fois plus lourd que l'électron, on peut, en première approximation, considérer qu'il est immobile et que l'électron tourne autour de lui. On est en fait ramené à l'étude du mouvement d'une particule : l'électron. L'énergie potentielle de l'électron est définie à une constante près que nous supposerons nulle lorsque le proton et l'électron sont

infiniment éloignés l'un de l'autre. Deux cas peuvent se présenter selon la valeur de l'énergie totale  $E$  :

- Si  $E \geq 0$ , on a un *état de diffusion*. On l'observe lors de la collision entre un électron et un proton. L'énergie  $E$  peut varier de façon continue et prendre toutes les valeurs possibles entre zéro et l'infini.
- Si  $E < 0$ , on a un *état lié*. L'électron et le proton restent toujours très proches et ne peuvent s'éloigner indéfiniment l'un de l'autre. Contrairement à ce que prévoit la mécanique classique, seules certaines valeurs de  $E$  sont permises. Les états d'énergie sont quantifiés et ne peuvent prendre que les valeurs :

$$\varepsilon_n = -13,6/n^2 \text{ eV} \quad (1.10)$$

Dans cette expression,  $n$  est un entier strictement positif appelé *nombre quantique principal* (rappelons que  $1\text{eV}=1,6 \times 10^{-19} \text{ J}$ ). L'*état fondamental* de l'atome d'hydrogène correspond à  $n = 1$  et vaut  $\varepsilon_1 = -13,6 \text{ eV}$ . Les états d'énergie supérieurs sont appelés *états excités* et correspondent à  $n > 1$ . Pour un état d'énergie donnée,  $\varepsilon_n$ , on a plusieurs configurations possibles correspondant aux nombres quantiques  $\ell, m, s, s_z$  qui obéissent aux lois suivantes :

- $0 \leq \ell \leq n - 1$  ( $\ell$  entier). C'est le nombre quantique secondaire  $\ell$ , lié au moment angulaire orbital de l'électron.
- $-\ell \leq m \leq +\ell$  ( $m$  entier). C'est le nombre quantique magnétique  $m$ , lié à la projection du moment angulaire orbital sur l'axe  $z$ .
- $s = \frac{1}{2}$ . C'est le nombre quantique de spin.
- $-\frac{1}{2} \leq s_z \leq +\frac{1}{2}$ . La quantité  $s_z$  est le nombre quantique lié à la projection du spin sur l'axe  $z$ . Ce nombre ne peut prendre que 2 valeurs :  $+\frac{1}{2}$  ou  $-\frac{1}{2}$ .

Une configuration correspond à la donnée de l'ensemble des nombres quantiques  $(n, \ell, m, s, s_z)$  qui décrit complètement le système. Le *degré de dégénérescence* est le nombre de configurations associées à ce niveau d'énergie.

#### 1.11.4 Conditions aux limites

Tout problème physique est caractérisé par des conditions aux limites qui imposent des contraintes à la solution générale de l'équation de Schrödinger. Pour un problème à une dimension où le potentiel est fini partout, on applique les conditions suivantes aux discontinuités du potentiel :

- Continuité de la fonction d'onde.
- Continuité de la dérivée de la fonction d'onde.



### 1.11.5 Marche de potentiel

Considérons le potentiel suivant :

$$\begin{cases} V(x) = 0 & \text{pour } x < 0 \\ V(x) = V_0 & \text{pour } x \geq 0 \end{cases} \quad (1.11)$$

Classiquement, deux cas sont à considérer :

- Si  $0 \leq E < V_0$ , la particule ne peut se déplacer que dans la partie gauche de l'espace. Sa vitesse est donnée par  $v = \sqrt{2E/m}$  et reste constante dans toute cette région. Lorsque la particule arrive sur la marche de potentiel, elle est réfléchiée et ne peut pas explorer la région de droite.
- Si  $E \geq V_0$ , la particule peut aller partout. Dans la région de gauche, elle a une vitesse donnée par l'expression ci-dessus. Dans la partie droite ( $x \geq 0$ ), sa vitesse est plus petite et égale à  $v = \sqrt{2(E - V_0)/m}$ . Une particule arrivant de  $x = -\infty$  est donc freinée au point  $x = 0$ .

La section 4.5 de MQ résout l'équation de Schrödinger en tenant compte des conditions aux limites à la discontinuité du potentiel. On trouve que le comportement de la particule est très différent du comportement classique. Supposons qu'elle vienne de la droite.

- Lorsque  $0 \leq E < V_0$ , la fonction d'onde de la particule n'est pas nulle dans le domaine pour  $x > 0$ . L'onde incidente associée à la particule pénètre sous la marche de potentiel. La fonction d'onde contient un terme exponentiel décroissant, si bien que sa probabilité de présence diminue fortement lorsque l'on pénètre de plus en plus sous la marche mais l'onde incidente est intégralement réfléchiée par la marche de potentiel.
- Si  $E \geq V_0$ , la particule peut explorer tout l'espace. Toutefois, lorsque l'onde incidente venant de la gauche arrive sur la marche de potentiel, une partie est réfléchiée et l'autre partie transmise. Il y a donc une différence avec le comportement classique dans lequel le corpuscule n'est pas réfléchi mais freiné.

### 1.11.6 Effet tunnel

Lorsque la marche de potentiel dont nous venons de parler se réduit à une fine barrière, il apparaît un nouveau phénomène : l'*effet tunnel*. C'est un processus important pour la physique des semi-conducteurs. Considérons par exemple le profil de potentiel unidimensionnel suivant :

$$\begin{aligned} V &= 0 & \text{pour } x < 0 \text{ et } x > L & \quad (\text{régions I et III}) \\ V &= V_0 & \text{pour } 0 \leq x \leq L & \quad (\text{région II}) \end{aligned} \quad (1.12)$$

Pour une particule de masse  $m$ , située initialement en  $x < 0$  et d'énergie cinétique  $E$  est inférieure à  $V_0$ , le coefficient de transmission  $T$  de la région I vers la région III

vaut (MQ section 4.7) :

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2 \operatorname{sh}^2 \left[ \sqrt{2m} L^2 (V_0 - E) / \hbar \right]}{4E(V_0 - E)}} \quad (1.13)$$

Si  $2m(V_0 - E)L^2/\hbar^2 \gg 1$  (cas d'une barrière dite « épaisse »), l'équation ci-dessus se simplifie en

$$T \simeq \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp \left[ -\frac{2\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} L \right].$$

En mécanique classique, lorsque  $E < V_0$ , une particule située initialement dans la région I, ne peut pas passer dans la région III. Ce passage sous la barrière, que l'on appelle « *effet tunnel* », est possible en mécanique quantique. Ce phénomène est observé dans la nature avec une probabilité mesurable lorsque les conditions sont remplies. Comme on peut le deviner en examinant les équations ci-dessus, l'effet tunnel ne peut être observé de manière notable que si la masse de la particule est faible, si la hauteur de la barrière, vue par la particule (*i.e.*  $(V_0 - E)$ ), est petite et si sa largeur  $L$  est étroite. L'effet tunnel est un phénomène qui intervient souvent dans les dispositifs semi-conducteurs.

## EXERCICES

---

### Exercice 1.1

Calculer la longueur d'onde associée à un photon, un électron et à un neutron de 1 eV.

---

### Exercice 1.2

Calculer le commutateur  $[\hat{x}, \hat{p}_x]$ . Est-il possible de mesurer simultanément la position  $x$  et l'impulsion  $p_x$  d'une particule ?

---

### Exercice 1.3

Calculer la différence d'énergie (en J et eV) entre le premier état excité et l'état fondamental d'un électron enfermé dans une boîte cubique de  $1\mu\text{m}$  de côté.

---

**Exercice 1.4**

Le profil de la barrière située à l'interface d'une structure métal–semi-conducteur peut être approchée par une barrière triangulaire. Le coefficient de transmission vaut  $T(E) = \exp \left[ \frac{-4\sqrt{2m^*}}{3eE\hbar} (V_0 - E)^{3/2} \right]$  où  $V_0$  est la hauteur de la barrière,  $E$  le champ électrique responsable de sa formation et  $m^*$  la masse de l'électron dans le milieu (elle est différente de  $m$ , celle de l'électron libre). Calculer la probabilité d'effet tunnel à  $E = 0$  pour  $V_0 = 0,5 \text{ eV}$  et  $V_0 = 0,2 \text{ eV}$  sachant que  $E = 10^6 \text{ V/cm}$  et  $m^* = 0,1m$ .

## CORRIGÉS

---

**Exercice 1.1**

La longueur d'onde est donnée par l'équation 1.1. En l'appliquant on trouve  $1,24 \mu\text{m}$  pour le photon (infrarouge),  $12,3 \text{ \AA}$  pour l'électron et  $0,28 \text{ \AA}$  pour le neutron. Ces différentes valeurs proviennent des masses différentes des particules.

---

**Exercice 1.2**

Calculons le commutateur en l'appliquant sur une fonction quelconque.

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] f(x) = x \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) f(x) - \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) (xf(x)) = i\hbar f(x)$$

Par conséquent  $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$ . Le commutateur des deux observables étant différent de zéro, on ne peut les mesurer simultanément.

---

**Exercice 1.3**

On a (équation 1.9)  $\Delta E = \varepsilon_{211} - \varepsilon_{111} = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = 1,79 \times 10^{-25} \text{ J} = 1,12 \times 10^{-6} \text{ eV}$ .

---

**Exercice 1.4**

On trouve  $T(0) = \exp(-8,41) = 2,2 \times 10^{-4}$  pour  $V_0 = 0,5 \text{ eV}$  et  $T(0) = 0,12$  pour  $V_0 = 0,2 \text{ eV}$

## Chapitre 2

---

# Physique statistique

Les systèmes macroscopiques sont constitués d'un grand nombre de particules et on ne peut suivre toutes les trajectoires de celles-ci. Pourtant, on peut observer, à notre échelle, des lois d'une grande simplicité. Ainsi, la pression  $P$ , le volume  $V$  et la température  $T$  d'une mole de gaz parfait sont reliés par l'équation d'état  $PV = RT$ , où  $R$  est la constante des gaz parfaits. Il peut donc émerger, de l'extrême complexité que représente l'évolution d'un grand nombre de particules, des lois physiques d'une forme particulièrement simple. La *physique* (ou *mécanique*) *statistique* permet de décrire les propriétés d'un très grand nombre de particules et donne un fondement à la thermodynamique.

À un instant donné les particules d'un système sont dans une certaine configuration que l'on désigne sous le nom de *micro-état*. La connaissance de celui-ci permet de complètement déterminer le système au niveau microscopique. Il peut s'agir d'un état quantique pur ou d'un état de mélange.

### 2.1 POSTULATS

La physique statistique est construite à partir de *postulats*.

#### 2.1.1 Postulat 1

Si la seule information que nous ayons sur un système isolé et en équilibre est qu'il a une énergie égale à  $E$ , il n'y a, a priori, aucune raison de favoriser un des micro-états qui lui est accessible plutôt qu'un autre. C'est ce que traduit le premier postulat de la physique statistique qui dit que *tous les micro-états accessibles à un système isolé en équilibre sont équiprobables*.

Ce postulat revient à dire que l'information connue sur le système est minimum. Si  $\Omega(E)$  est le nombre de micro-états accessibles à un système isolé en équilibre, la probabilité pour qu'il soit dans un micro-état donné est égale à  $1/\Omega(E)$ . Si ce n'est pas le cas, le système est hors d'équilibre et il évolue pour satisfaire au postulat d'équiprobabilité.

### 2.1.2 Postulat 2 : Hypothèse ergodique

À un instant donné, un système macroscopique en équilibre se trouve dans un micro-état et un seul. Au cours du temps, le système change de micro-état par suite des interactions résiduelles qui sont, en particulier, associées à l'incertitude  $\delta E$  sur l'énergie. Si l'on suit son évolution pendant un temps infini (ou très long), le temps passé dans chacun des micro-états est le même pour tous : c'est le premier postulat énoncé plus haut. Au lieu de considérer *un seul système*, et de suivre son évolution dans le temps, on peut considérer un *ensemble de systèmes* à un instant donné. Cet ensemble est construit de manière à ce que la probabilité d'obtenir un de ces systèmes dans un micro-état particulier soit la même quel que soit le micro-état considéré.

En physique statistique, une collection de systèmes qui sont des répliques macroscopiques exactes du système initial est appelée *un ensemble*. Le second postulat dit que *la moyenne dans le temps d'un paramètre quelconque est égale à la moyenne de ce paramètre prise sur un ensemble de systèmes*. Ce postulat est appelé parfois *hypothèse ergodique*<sup>1</sup>.

## 2.2 ENTROPIE STATISTIQUE

Le nombre  $\Omega(E)$  de micro-états accessibles à un système d'énergie  $E$  est en général extrêmement grand pour les systèmes macroscopiques. Aussi préfère-t-on utiliser son logarithme népérien  $\ln \Omega(E)$  qui est monotone croissant et ne change pas le sens de variation de  $\Omega(E)$ . Les quantités  $\Omega(E)$  et  $\ln \Omega(E)$  sont sans dimension mais l'expression  $S = k_B \ln \Omega(E)$ , où  $k_B$  est la constante de Boltzmann, a la dimension de l'entropie thermodynamique. C'est l'*entropie statistique* définie pour un système en équilibre.

### 2.2.1 Nombre de micro-états

Le nombre de micro-états accessibles au système ne prend une valeur raisonnable que pour des systèmes quantiques très simples. Dans une approche quantique des systèmes

---

1. Illustrons cette hypothèse avec l'analogie suivante. Jouons avec un dé non truqué. La probabilité d'observer l'une des faces est égale à  $1/6$ . On peut étudier ce système en lançant  $N$  fois le dé, ce qui revient à faire une moyenne dans le temps sur celui-ci. On peut aussi lancer une fois  $N$  dés identiques, ce qui revient à faire une moyenne sur un ensemble. L'hypothèse ergodique suppose que, lorsque  $N \rightarrow \infty$ , les deux expériences conduisent à la même distribution de probabilité.

constitués de particules indépendantes, les micro-états sont construits à partir des états quantiques à une particule (cf. PS section 2.1.4). Leur dénombrement exact est en principe possible bien que, dans la pratique, difficile. Il faut aussi tenir compte du spin des particules et de la nature de celles-ci, fermions ou bosons.

Dans une approche classique, le problème est plus complexe dans le principe mais le dénombrement s'avère plus facile. Pour cela, on introduit l'espace de phase du système. Pour une particule unique c'est l'espace cartésien dont les axes sont les variables  $x, y, z, p_x, p_y$  et  $p_z$ . Une configuration de la particule correspond à un point  $(\mathbf{r}, \mathbf{p})^2$  de l'espace de phase. Quand elle évolue dans le temps, elle décrit une trajectoire. Si  $f$  est le nombre de degrés de liberté d'un système, la dimension de l'espace de phase est égale à  $2f$  ( $f$  coordonnées d'espace et  $f$  impulsions).

Dans une approche quantique, un micro-état est une configuration microscopique particulière du système. Comme la physique classique est la limite de la physique quantique, nous devons, pour une énergie totale donnée, avoir le même nombre de micro-états classiques que dans l'approche quantique. Cette contrainte nous interdit d'identifier un micro-état classique à une configuration particulière de l'espace de phase. En effet, pour un système d'énergie donnée, la mécanique classique prévoit une infinité de configurations puisque les variables de l'espace de phase sont continues.

L'hypothèse supplémentaire qu'il faut introduire pour réaliser la jonction entre quantique et classique est de supposer que le volume occupé par un *micro-état classique* est un cube de volume  $(\delta q \delta p)^f = h^f$ , où  $f$  est le nombre de degrés de liberté ( $f = 3N$  si on a  $N$  particules). La règle pour calculer le nombre de micro-états classiques est alors la suivante :

- 1) On évalue le volume  $V$  de l'espace de phase qui est accessible au système possédant  $f$  degrés de liberté.
- 2) Le nombre de micro-états est alors égal à  $V/h^f$ .
- 3) Pour tenir compte du spin  $s$ , on introduit une dégénérescence additionnelle égale à  $2s + 1$  (égale à deux seulement, dans le cas des photons). À chaque micro-état classique sans spin, on peut donc associer  $2s + 1$  micro-états différents. Le nombre total de micro-états classiques est alors égal à  $\Omega = (2s + 1) (V/h^f)$ .

### 2.2.2 Irréversibilité

Considérons un système *isolé*, en équilibre statistique, dont l'état macroscopique est déterminé par un ensemble de contraintes externes. Soit  $\Omega_i$  le nombre de micro-états accessibles. Si l'on supprime une ou plusieurs des contraintes, le nombre de micro-états accessibles sera plus grand et le système évolue de manière à pouvoir accéder à tous ces micro-états. Appelons  $\Omega_f$  le nombre de micro-états accessibles

---

2.  $\mathbf{r}$  et  $\mathbf{p}$  sont respectivement les vecteurs position et impulsion.

dans l'état final lorsque les contraintes ont été enlevées. À l'équilibre statistique, tous ces micro-états sont équiprobables.

- Si  $\Omega_f > \Omega_i$ , la transformation est *irréversible* car, si l'on rétablit les contraintes, on ne reviendra pas dans la situation initiale.
- Si  $\Omega_f = \Omega_i$ , la transformation est *réversible*. Si l'on remet les contraintes sur le système, on revient dans l'état initial.

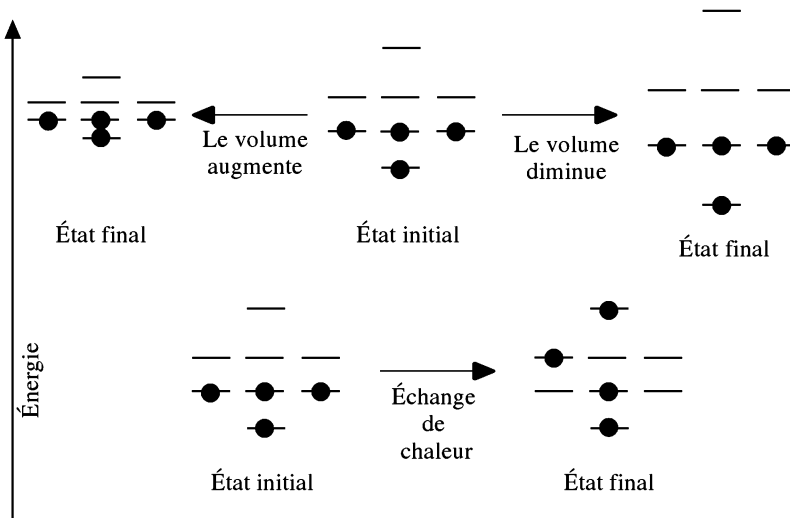
L'entropie d'un système isolé en équilibre augmente lors d'une transformation. C'est la formulation microscopique du deuxième principe de la thermodynamique.

## 2.3 TRAVAIL, CHALEUR

Il existe, au niveau macroscopique, deux types d'échanges d'énergie : le *travail* et la *chaleur*. Prenons un modèle de  $N$  particules indépendantes dans une boîte cubique de côté  $L$ . Le volume de cette boîte vaut  $L^3$  et les niveaux d'énergie à une particule valent :

$$\varepsilon_{n_x, n_y, n_z} = (\pi^2 \hbar^2) / (2mV^{2/3}) (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2).$$

Le travail mécanique correspond à une variation du volume  $V$  du système. Si  $V$  diminue, l'équation ci-dessus indique que les niveaux s'espacent. Au contraire, si  $V$  augmente, les niveaux à une particule se rapprochent. Ceci est illustré dans la partie supérieure de la figure 2.1. Une variation de volume s'accompagne d'un transfert d'énergie *mécanique*. Celle-ci se traduit par un changement de l'espacement des niveaux d'énergie sans changement de l'occupation de ceux-ci.



**Figure 2.1** Échange de travail (partie supérieure) et de chaleur (partie inférieure) à l'échelle microscopique.

Si le volume reste constant, les niveaux d'énergie sont fixés et il n'y a pas d'échange d'énergie mécanique. Par contre, on peut changer l'occupation des niveaux à une particule. Ceci se traduit par une variation d'énergie du système qui correspond à un *échange de chaleur*, illustré dans la partie inférieure de la figure 2.1.

Pour les systèmes macroscopiques, constitués d'un grand nombre de particules, la distribution de probabilité d'une variable macroscopique,  $y$ , est extrêmement piquée et les fluctuations autour de la valeur la plus probable,  $\tilde{y}$ , sont négligeables. Toute mesure de la variable macroscopique  $y$  conduit à la valeur la plus probable  $\tilde{y}$  qui ne peut être distinguée de la valeur moyenne  $\langle y \rangle$ .

## 2.4 CONDITIONS D'ÉQUILIBRE

Tout système isolé évolue vers l'équilibre, s'il n'y est pas déjà. Au cours de son évolution, son entropie augmente et devient maximale lorsque l'état d'équilibre est atteint. On peut appliquer cette condition, qui n'est rien d'autre que l'expression microscopique du second principe, à l'étude de l'équilibre thermodynamique de deux systèmes macroscopiques en contact (cf. PS, chapitre 4). La recherche du maximum de l'entropie est bien sûr équivalente à celle du maximum du nombre de micro-états accessibles au système, puisque la fonction logarithme est une fonction monotone croissante de  $\Omega(E)$ . Le nombre de micro-états qui sont accessibles à un système est une fonction explicite de l'énergie  $E$ , du volume  $V$  et du nombre de particules  $N$  (nous ne considérons ici qu'un seul type de particules). On peut facilement se convaincre de cette affirmation en considérant  $N$  particules dans une boîte cubique. Il est clair que  $\Omega$  dépend de  $E$  puisque la somme des carrés des nombres quantiques associés à chaque particule est proportionnelle à  $E$ . La quantité  $\Omega$  dépend aussi de  $V$  par l'intermédiaire des niveaux d'énergie à une particule (cf. § 2.3). Enfin  $\Omega$  dépend de  $N$  puisque les micro-états qui nous intéressent sont des configurations à  $N$  particules (par conséquent tout changement de  $N$  induit un changement de  $\Omega$ ). L'entropie dépend donc aussi de ces trois variables ( $S = S(E, V, N)$ ).

Nous allons considérer deux systèmes, notés 1 et 2, qui sont susceptibles d'être en interaction par l'intermédiaire d'une cloison dont on précisera les propriétés par la suite. Nous noterons leur énergie par  $E_1$  et  $E_2$ , respectivement, et leur entropie par  $S_1$  et  $S_2$ . L'ensemble des systèmes 1 et 2 constitue le système total que l'on suppose être isolé du milieu extérieur par une paroi adiabatique<sup>3</sup> fixe.

---

3. *i.e.* ne laissant pas passer la chaleur.



### 2.4.1 Équilibre thermique

Si les systèmes 1 et 2 sont séparés par une paroi diatherme<sup>4</sup>, fixe et imperméable aux particules, l'équilibre est atteint lorsque :

$$T_1 = T_2$$

La température absolue  $T$  d'un système d'énergie interne  $E$  et d'entropie  $S$  est définie par la relation :

$$\frac{1}{T} = \left( \frac{\partial S}{\partial E} \right)_{V,N}$$

L'équilibre thermique est obtenu lorsqu'il y a égalité des températures : on retrouve le même résultat qu'en thermodynamique. Par la suite, nous utiliserons souvent le paramètre  $\beta$  pour désigner :

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

Au cours de la transformation conduisant à l'équilibre thermique, l'entropie  $S$  du système total ne peut que croître car celui-ci est *isolé*. On peut montrer que la chaleur passe du corps chaud vers le corps froid et non en sens inverse et retrouver ainsi une des formulations du second principe de la thermodynamique.

### 2.4.2 Équilibre thermique et mécanique

Supposons à présent que la paroi séparant les systèmes 1 et 2 soit diatherme, mobile sans frottements, et imperméable aux particules. Les échanges de travail et de chaleur sont alors possibles entre les deux systèmes. Les conditions d'équilibre sont alors :

$$T_1 = T_2 \quad \text{et} \quad P_1 = P_2$$

où la pression  $P$  est définie comme :

$$\frac{P}{T} = \left( \frac{\partial S}{\partial V} \right)_{E,N}$$

A l'équilibre thermodynamique, la température et la pression des deux systèmes sont égales. Ces conditions sont en accord avec les lois de la thermodynamique.

### 2.4.3 Échange de chaleur, de travail et de particules

Nous allons à présent considérer le cas le plus général où la paroi séparant les systèmes 1 et 2 est diatherme, mobile et perméable aux particules qui sont supposées du même

---

4. *i.e.* laissant passer la chaleur.

type. L'état d'équilibre est obtenu lorsque :

$$T_1 = T_2, \quad P_1 = P_2 \quad \text{et} \quad \mu_1 = \mu_2$$

où  $\mu$  représente le potentiel chimique défini par :

$$-\frac{\mu}{T} = \left( \frac{\partial S}{\partial N} \right)_{E,V}$$

À l'équilibre, la température, la pression et le potentiel chimique des deux systèmes sont égaux. Le potentiel chimique est une quantité très importante en physique des semi-conducteurs. Dans ce domaine, il est improprement désigné sous le terme d'*énergie de Fermi*. En physique statistique, le terme énergie de Fermi est réservé au potentiel chimique à température nulle. À partir du chapitre 3, nous nous rallierons à cet usage qui est général dans la littérature sur les semi-conducteurs.

Les quantités  $T$ ,  $P$  et  $\mu$  sont des variables intensives<sup>5</sup>. Température, pression et potentiel chimique sont reliés à l'énergie interne  $E = E(S, V, N)$  par :

$$T = \left( \frac{\partial E}{\partial S} \right)_{E,V}, \quad P = - \left( \frac{\partial E}{\partial V} \right)_{S,N} \quad \text{et} \quad \mu = \left( \frac{\partial E}{\partial N} \right)_{S,V} \quad (2.1)$$

Ces relations permettent de retrouver l'expression différentielle  $dE$  de l'énergie interne connue en thermodynamique. En effet, écrivons que  $E = E(S, V, N)$  est une différentielle totale :

$$dE = \left( \frac{\partial E}{\partial S} \right)_{V,N} dS + \left( \frac{\partial E}{\partial V} \right)_{S,N} dV + \left( \frac{\partial E}{\partial N} \right)_{S,V} dN$$

et remplaçons les dérivées partielles de  $E$  par leurs expressions ci-dessus, nous obtenons la relation :

$$dE = T dS - P dV + \mu dN$$

La différentielle de l'énergie interne est la somme de termes qui sont le produit d'une fonction intensive ( $T$ ,  $P$  ou  $\mu$ ), par la différentielle de la fonction extensive<sup>6</sup> conjuguée ( $S$ ,  $V$  ou  $N$ ).

En résumé, deux systèmes macroscopiques en contact échangent de la chaleur si leurs températures sont différentes. S'ils ont la même température, ils échangent du travail mécanique si leurs pressions sont différentes. Enfin, si leur température et leur pression sont identiques, ils échangent des particules si leurs potentiels chimiques sont différents.

5. Une variable intensive ne dépend pas de la taille du système.

6. Une variable extensive est proportionnelle à la taille du système.

## 2.5 ENSEMBLES

Le second postulat de la physique statistique introduit la notion d'*ensemble* pour calculer les propriétés macroscopiques d'un système composé d'un grand nombre de particules. Nous allons brièvement rappeler les ensembles utilisés en physique statistique en insistant sur leurs conditions d'application.

### 2.5.1 L'ensemble microcanonique

L'énergie d'un système isolé du monde extérieur est constante. Il est, dans la pratique, impossible de fixer exactement la valeur de l'énergie et celle-ci est définie à une valeur  $\delta E \ll E$  près. Cette incertitude a deux origines, l'une de nature purement expérimentale, l'autre de nature quantique. Cette dernière est liée à la durée limitée pendant laquelle on observe le système. Supposons donc que l'énergie du système soit comprise entre  $E_0$  et  $E_0 + \delta E$ . Les micro-états qui lui sont accessibles sont ceux pour lesquels l'énergie totale  $E$  appartient à l'intervalle :

$$E_0 \leq E \leq E_0 + \delta E \quad (\delta E \ll E_0) \quad (2.2)$$

Au lieu de considérer un seul système dont on suit l'évolution au cours du temps, on considère un *ensemble*, i.e. une collection de systèmes qui sont la réplique du système initial au sens macroscopique (cela signifie qu'il n'est pas possible de les distinguer lorsque l'on effectue des mesures sur les grandeurs macroscopiques). Chaque système de cette collection est dans un micro-état particulier qui satisfait à la condition (2.2). Tous les micro-états sont équiprobables puisqu'il y a équilibre statistique. Une collection de systèmes définis en ces termes s'appelle un *ensemble microcanonique*. Si  $\Omega$  est le nombre de micro-états accessibles, la probabilité de trouver un système particulier de cet ensemble dans un micro-état donné est égale à  $\frac{1}{\Omega}$ . Dans tous les problèmes de physique statistique où l'on s'intéresse à un système isolé on doit, en principe, utiliser l'ensemble microcanonique. Comme son utilisation est complexe, on emploie souvent, pour traiter la physique d'un système isolé, d'autres ensembles, qui sont des approximations, mais qui permettent d'obtenir, pour les systèmes constitués d'un grand nombre de particules, des résultats pratiquement identiques tout en nécessitant moins d'efforts.

### 2.5.2 L'ensemble canonique

L'*ensemble canonique* s'emploie :

- pour un système  $S$  couplé à un thermostat  $T$ ,
- pour un système dont l'énergie moyenne est fixée.

Dans le premier cas, comme le système  $S+T$  est isolé et en équilibre statistique, on peut le décrire par l'ensemble microcanonique. L'ensemble canonique résulte alors d'un développement de Taylor du nombre de micro-états du système isolé  $S+T$ .

Dans le second cas, on l'obtient à partir de l'ensemble microcanonique appliqué au système considéré en tenant compte de la contrainte sur son énergie moyenne. Il faut donc que l'entropie du système soit maximum à énergie moyenne fixée. On obtient, dans les deux cas, la distribution canonique dont nous allons maintenant donner l'expression pour un système dont les niveaux d'énergie sont discrets.

Considérons un micro-état particulier  $r\{j\}$  du système  $\mathcal{S}$ , d'énergie  $E_r$ . Nous caractériserons un micro-état par : le nombre quantique  $r$  auquel est associé le niveau d'énergie  $E_r$ , et l'ensemble  $\{j\}$  qui contient les autres nombres quantiques nécessaires pour définir complètement le micro-état lorsque le niveau d'énergie est dégénéré. La probabilité  $\mathcal{P}_{r\{j\}}$  d'obtenir un micro-état  $r\{j\}$ , d'énergie  $E_r$ , est donnée par :

$$\mathcal{P}_{r\{j\}} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\beta E_r} \quad (2.3)$$

où  $\mathcal{Z}$  est la *fonction de partition*. Cette dernière exprime le fait que la somme des probabilités est égale à 1. Son expression est :

$$\mathcal{Z} = \sum_r \sum_{\{j\}} e^{-\beta E_r}$$

Le terme  $e^{-\beta E_r}$  se nomme *facteur de Boltzmann* et la distribution (2.3) s'appelle parfois *distribution de Gibbs*. Il est important de rappeler que la notion d'ensemble permet de calculer la valeur moyenne des grandeurs macroscopiques comme une moyenne prise sur l'ensemble des systèmes à un instant donné, plutôt que par une moyenne dans le temps de ces mêmes grandeurs pour un système particulier (hypothèse ergodique). L'équation (2.3) donne la probabilité de trouver le système  $\mathcal{S}$  dans un micro-état particulier  $r\{j\}$  d'énergie  $E_r$ . Si  $g_r$  est la dégénérescence du niveau d'énergie  $E_r$ , la probabilité de trouver  $\mathcal{S}$  avec une énergie  $E_r$  est égale à :

$$\mathcal{P}(E_r) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\{j\}} e^{-\beta E_r} = \frac{g_r}{\mathcal{Z}} e^{-\beta E_r}$$

Si le spectre en énergie du système est continu, ou si les niveaux sont tellement proches les uns des autres qu'ils apparaissent comme continus au niveau macroscopique, la probabilité d'observer une énergie comprise entre  $E$  et  $E + \delta E$  ( $\delta E \ll E$ ) est égale à :

$$\mathcal{P}(E) = \frac{\Omega(E)}{\mathcal{Z}} e^{-\beta E}$$

où  $\Omega(E)$  est le nombre de micro-états compris entre  $E$  et  $E + \delta E$ . Si  $\mathcal{S}$  est un système macroscopique normal,  $\Omega(E)$  croît fortement, alors que  $e^{-\beta E}$  est une fonction décroissante. Par conséquent, le produit  $\Omega(E)e^{-\beta E}$  est une fonction fortement piquée à la valeur  $E = \tilde{E}$ . Les fluctuations de  $\mathcal{P}(E)$  autour de  $\mathcal{P}(\tilde{E})$  seront d'autant plus faibles

que le nombre de degrés de liberté du système est plus grand. La largeur relative de la distribution en énergie varie comme  $\frac{1}{\sqrt{N}}$ , où  $N$  est le nombre de particules. Ces fluctuations sont donc négligeables pour un système macroscopique. Dans ce cas, l'ensemble canonique peut alors avantageusement remplacer l'ensemble microcanonique pour décrire les propriétés d'un système isolé, bien qu'il ne s'applique, en toute rigueur, qu'à un système en équilibre avec un thermostat.

En résumé, l'ensemble canonique permet de décrire les propriétés d'un système en équilibre avec un thermostat à température  $T$ . Il peut être aussi utilisé pour étudier un système dont l'énergie moyenne  $\langle E \rangle$  est fixée. Son intérêt par rapport au système microcanonique, est de remplacer un décompte de micro-états soumis à une inégalité (équation 2.2), par une somme étendue à tout l'espace de phase, donc sans restriction, plus facile à évaluer dans la pratique. La sélection, dans l'espace de phase, des micro-états pertinents est faite par le facteur de Boltzmann qui extrait ceux dont l'énergie moyenne est égale à la valeur fixée. Ce nombre de micro-états correspond pratiquement, pour la très grande majorité des systèmes, à celui obtenu avec l'ensemble microcanonique.

### 2.5.3 Ensemble grand canonique

L'ensemble grand canonique s'emploie :

- si le système  $S$  en équilibre avec un réservoir de chaleur et de particules  $\mathcal{T}$  ;
- si l'énergie moyenne et le nombre moyen de particules de  $S$  sont fixés.

On obtient la distribution grand canonique selon le même schéma que celui présenté pour la distribution canonique (développement de Taylor ou maximisation de l'entropie à énergie moyenne et nombre moyen de particules fixés). Voyons cela pour un système constitué d'un seul type de particules.

Considérons un micro-état particulier  $N, r, \{j\}$  du système  $S$  d'énergie  $E_{N,r}$ . L'ensemble  $\{j\}$  caractérise les autres nombres quantiques nécessaires pour préciser exactement le micro-état lorsque le niveau d'énergie est dégénéré. La probabilité d'obtenir un micro-état  $N, r, \{j\}$  particulier est donnée par la distribution grand canonique :

$$\mathcal{P}_{N,r,\{j\}} = \frac{1}{\Xi} e^{\beta(\mu N - E_{N,r})}$$

avec

$$\Xi = \sum_N \sum_r \sum_{\{j\}} e^{\beta(\mu N - E_{N,r})} \quad (2.4)$$

où  $\Xi$  est la fonction de partition grand canonique.

## 2.6 THÉORÈME D'ÉQUIPARTITION DE L'ÉNERGIE

L'énergie cinétique des particules est une fonction quadratique des impulsions. Cette propriété permet de calculer simplement l'énergie moyenne en appliquant le *théorème de l'équipartition de l'énergie*. Ceci peut être généralisé à des particules dans un champ de potentiel si celui-ci est une fonction quadratique des coordonnées. Le *théorème d'équipartition* de l'énergie dit que *l'énergie moyenne d'un système dont l'énergie totale est la somme des carrés des composantes de l'impulsion, ou des coordonnées, est égale à  $\frac{1}{2}k_B T$  fois le nombre de ces termes quadratiques*.

Ce théorème ne s'applique que si l'énergie totale est composée de termes quadratiques. Il n'est valable que lorsque le système a un *comportement classique* et ne s'applique pas à un système quantique.

## 2.7 STATISTIQUES QUANTIQUES

Les électrons jouent un grand rôle dans les propriétés électriques des semi-conducteurs. Ce sont des fermions qui obéissent au principe de Pauli. Les photons, qui interviennent notamment dans l'interaction rayonnement-matière, sont par contre des bosons. Fermions et bosons obéissent à des statistiques différentes qu'il est maintenant bon de préciser (cf. PS, chapitre 8 et 9).

### 2.7.1 Distribution de Fermi-Dirac

Considérons un gaz parfait de fermions à la température  $T$  et portons notre attention sur un *micro-état particulier*  $i$  associé à une *particule* qui sera considéré comme un sous-système du système total. Le reste du système joue le rôle d'un réservoir de chaleur et de particules pour le micro-état  $i$ . Moyennant cette hypothèse, on peut utiliser la distribution grand canonique pour calculer le nombre moyen,  $\langle n_i \rangle$ , de fermions occupant le micro-état  $i$ . On trouve, compte tenu du principe d'exclusion de Pauli (cf. PS, section 8.5), la *distribution de Fermi-Dirac*. :

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\epsilon_i - \mu}{k_B T}\right) + 1} \quad (2.5)$$

Il est très important de rappeler que  $\langle n_i \rangle$  se rapporte au micro-état à une particule  $i$  et *non* au niveau d'énergie  $i$ . En effet, pour des fermions de spin  $s$ , le niveau d'énergie  $\epsilon_i$  est  $2s + 1$  fois dégénéré à cause du spin. Ce niveau peut, par ailleurs, être  $g_i$  fois dégénéré.

Le potentiel chimique  $\mu$  est déterminé en remarquant que la somme de tous les  $\langle n_i \rangle$  doit donner le nombre total de particules du gaz. L'énergie de Fermi,  $E_F$ , est, en physique statistique, le potentiel chimique à température nulle ( $E_F = \mu(T = 0)$ )

et la température de Fermi est définie par  $k_B T_F = E_F$ . Le potentiel chimique d'un gaz de fermions décroît lorsque la température augmente pour s'annuler lorsque  $T$  est très légèrement inférieur à  $T_F$ . Il devient ensuite négatif tout en continuant à décroître lorsque  $T$  augmente.

### 2.7.2 Distribution de Bose-Einstein

Pour les bosons, au contraire, il n'y a pas de limitation pour occuper un micro-état accessible au système. Par le même raisonnement que pour les fermions, on peut calculer le nombre moyen de bosons par micro-état  $i$ . On trouve dans ce cas (cf. PS, section 8.6) la *distribution de Bose-Einstein* :

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp \left( \frac{\epsilon_i - \mu}{k_B T} \right) - 1} \quad (2.6)$$

Cette expression ne diffère de la distribution de Fermi-Dirac que par un changement du signe au dénominateur mais ceci a d'importantes conséquences. Alors que le nombre moyen d'occupation d'un micro-état est toujours inférieur à l'unité pour les fermions, il peut être supérieur à cette valeur pour les bosons.

Le potentiel chimique  $\mu$  est obtenu en normalisant au nombre total de particules. Le nombre moyen de particules ne peut être négatif ; par conséquent,  $\exp((\epsilon_i - \mu)/k_B T)$  doit toujours être supérieur à l'unité. Cela signifie que  $\epsilon_i > \mu$  pour tous les micro-états, y compris le plus bas. Si l'on prend comme origine des énergies celle de l'état à une particule le plus bas, le potentiel chimique  $\mu$  est toujours négatif. En fait, il est pratiquement nul jusqu'à une température  $T_B$  appelée température de Bose. Au-dessous de cette dernière, on dit qu'il y a condensation de Bose-Einstein (tous les bosons sont dans l'état d'énergie le plus bas). Au-dessus de cette température, le potentiel chimique, qui est négatif, diminue de manière notable quand la température augmente.

### 2.7.3 Limite classique

La limite classique est obtenue lorsque  $\exp((\epsilon_i - \mu)/k_B T) \gg 1$ . Dans ce cas on obtient la distribution classique de *Maxwell-Boltzmann*, pour les fermions et pour les bosons :

$$\langle n_i \rangle \simeq \exp [ - (\epsilon_i - \mu) / k_B T ] .$$

Dans la limite classique, l'occupation d'un micro-état est très petite ce qui permet, pour les fermions, de ne pas tenir compte du principe de Pauli puisque la probabilité d'avoir deux particules dans le même micro-état est faible. Cette limite classique est obtenue lorsque  $\mu$  est négatif et tel que  $-\mu/k_B T \gg 1$ . Pour les fermions il faut que  $T \gg T_F$  et, pour les bosons, que  $T \gg T_B$ .

## 2.8 GAZ PARFAIT DE FERMİ

Les électrons de conduction d'un semi-conducteur sont souvent décrits comme un gaz de fermions sans interaction (gaz parfait). Une description classique suppose que les états de particules individuelles sont faiblement peuplés. Pour un gaz de fermions proche de la température nulle, les niveaux de particule individuelle sont, au contraire, fortement peuplés et cela nécessite un traitement quantique.

### 2.8.1 Gaz de Fermi

Nous allons établir, à l'aide de considérations simples, les principales propriétés d'un gaz, constitué de  $N$  fermions indépendants de masse  $m$  contenu dans le volume  $V$ . L'énergie des particules est purement cinétique ( $\epsilon = \frac{p^2}{2m}$ ). Le nombre,  $d^6N$ , de particules qui sont contenues dans un volume  $dV = d\mathbf{r}$  et qui ont une impulsion comprise entre  $\mathbf{p}$  et  $\mathbf{p} + d\mathbf{p}$  s'évalue en comptant, dans l'espace de phase, le nombre de micro-états accessibles pondéré par leur probabilité d'occupation.

- Le nombre de micro-états à une particule contenus dans le volume élémentaire  $dV d\mathbf{p}$  de l'espace de phase vaut :

$$g \frac{dV d\mathbf{p}}{h^3}$$

où  $g = 2s + 1$  est le facteur de dégénérescence dû au spin  $s$  des fermions. Pour un gaz d'électrons, on a  $s = \frac{1}{2}$ , donc  $g = 2$ .

- La probabilité qu'une particule occupe un micro-état particulier d'énergie  $\epsilon$ , sachant que le potentiel chimique du système est  $\mu$ , est donnée par la distribution de Fermi-Dirac (équation 2.5). Par conséquent :

$$d^6N = g \frac{dV d\mathbf{p}}{h^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}\right) + 1} \quad (2.7)$$

Le nombre de particules  $d^3N$ , dont l'impulsion est comprise entre  $\mathbf{p}$  et  $\mathbf{p} + d\mathbf{p}$ , est obtenu en intégrant  $d^6N$  par rapport aux coordonnées d'espace  $x$ ,  $y$  et  $z$ . Comme toutes les quantités qui interviennent dans le membre de droite de l'équation ci-dessus sont indépendantes de la position (le système est homogène), l'intégration est immédiate et conduit à :

$$d^3N = g V \frac{d\mathbf{p}}{h^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}\right) + 1} \quad (2.8)$$

Le nombre de particules  $dN$  dont le module de l'impulsion est compris entre  $p$  et  $p + dp$  s'obtient en exprimant (2.8) en coordonnées sphériques ( $p$ ,  $\theta$ ,  $\varphi$ ) et en



intégrant sur les angles. La fonction à intégrer ne dépend que du module  $p$  ( $\epsilon = \frac{p^2}{2m}$ ). Puisqu'elle est à symétrie sphérique dans l'espace des impulsions, il est possible d'utiliser directement l'expression  $d\mathbf{p} = 4\pi p^2 dp$  qui provient de l'intégration de  $d\mathbf{p}$  sur les angles  $\theta$  et  $\varphi$ . On obtient alors :

$$dN = gV \frac{4\pi p^2 dp}{h^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}\right) + 1}$$

La distribution de particules dont le module de l'impulsion est compris entre  $p$  et  $p + dp$  est égale à  $\frac{dN}{dp}$ . La distribution en énergie de ces particules,  $\frac{dN}{d\epsilon}$ , est obtenue en utilisant la relation  $p^2 = 2m\epsilon$ , soit  $\frac{dN}{d\epsilon} = \frac{dN}{dp} \frac{dp}{d\epsilon}$ . Comme  $\frac{dp}{d\epsilon} = \sqrt{\frac{m}{2\epsilon}}$  on a :

$$\frac{dN}{d\epsilon} = \frac{2\pi gV(2m)^{3/2}}{h^3} \frac{\sqrt{\epsilon}}{\exp\left(\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}\right) + 1}$$

L'intégrale des distributions en impulsion (ou en énergie) par rapport à  $p$  (ou à  $\epsilon$ ) donne le nombre total de particules contenues dans le volume  $V$  :

$$\int_0^\infty \frac{dN}{dp} dp = \int_0^\infty \frac{dN}{d\epsilon} d\epsilon = N$$

L'équation ci-dessus permet de déterminer le potentiel chimique  $\mu$  du système. Nous avons par exemple :

$$\int_0^\infty \frac{dN}{d\epsilon} d\epsilon = 2\pi \frac{gV}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\epsilon} d\epsilon}{\exp\left(\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}\right) + 1} = N$$

Si nous posons  $\frac{\epsilon}{kT} = x$  et  $\frac{\mu}{kT} = \eta$ , nous avons :

$$N = 2\pi \frac{gV}{h^3} (2m)^{3/2} (kT)^{3/2} \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{\exp(x - \eta) + 1}$$

Introduisons le nombre de particules par unité de volume  $\rho = \frac{N}{V}$  et les intégrales  $I_\nu(\eta)$  dites de Fermi<sup>7</sup>, nous obtenons :

$$\rho = 2\pi \frac{g}{h^3} (2m)^{3/2} (kT)^{3/2} I_{1/2}(\eta)$$

---

7. Les intégrales de Fermi sont définies par :

$$I_\nu(\eta) = \int_0^\infty \frac{x^\nu dx}{\exp(x - \eta) + 1}$$

Connaissant  $\frac{dN}{d\epsilon}$ , nous pouvons calculer l'énergie totale du gaz :

$$E = \int_0^\infty \epsilon \frac{dN}{d\epsilon} d\epsilon = 2\pi \frac{gV}{h^3} (2m)^{3/2} (k_B T)^{5/2} I_{3/2}(\eta)$$

puisque pour chaque valeur de  $\epsilon$  il y a  $\frac{dN}{d\epsilon}$  particules. On peut également (cf. PS, section 9.1) calculer l'équation d'état de ce gaz parfait de fermions. On trouve :

$$PV = \frac{2}{3} E$$

Cette expression est valable aussi bien pour un gaz parfait classique que pour un gaz parfait de fermions, ou de bosons.

### 2.8.2 Gaz de Fermi complètement dégénéré

Un gaz de Fermi dont la température est nulle est dit *complètement dégénéré*. C'est un cas limite intéressant que l'on rencontre pour certains systèmes (semi-conducteurs proches du zéro absolu, isolants, nucléons dans un noyau, etc.). Lorsque le système est complètement dégénéré, les particules occupent les niveaux à une particule les plus bas en respectant le principe d'exclusion de Pauli. Si le spin des particules vaut  $s = \frac{1}{2}$ , on peut mettre  $2s + 1 = 2$  particules sur chaque niveau de particule individuelle calculé sans tenir du spin. Le niveau d'énergie occupé le plus haut s'appelle le *niveau de Fermi* et l'énergie correspondante l'*énergie de Fermi*. Nous noterons cette dernière par le symbole  $E_F$ . En terme d'occupation des niveaux cela signifie que tous ceux qui ont une énergie  $\epsilon$  inférieure à  $E_F$  sont occupés alors que ceux pour lesquels  $\epsilon > E_F$  sont vides.

Le nombre de particules dans un micro-état donné à température nulle est égal à 1 au-dessous de l'énergie de Fermi et à 0 au-dessus. Pour  $N$  suffisamment grand, on peut évaluer le nombre de micro-états comme ci dessus, en se plaçant dans l'espace de phase. Soit  $p_F$  l'impulsion associée à l'énergie de Fermi :

$$E_F = \frac{p_F^2}{2m}$$

où  $\eta$  est un paramètre égal à  $\frac{\mu}{kT}$  pour un gaz de Fermi. A basse température,  $\eta$  est grand et on peut utiliser le développement asymptotique suivant :

$$\int_0^\infty \frac{f(x)dx}{\exp(x-\eta)+1} = \int_0^\eta f(x)dx + \frac{\pi^2}{6} f'(\eta) + \frac{7\pi^4}{360} f'''(\eta) + \dots$$

En se limitant au second ordre en  $T$ , on obtient les résultats suivants :

$$I_{1/2} = \frac{2}{3} \eta^{3/2} \left( 1 + \frac{\pi^2}{8\eta^2} \right) \quad \text{et} \quad I_{3/2} = \frac{2}{5} \eta^{5/2} \left( 1 + \frac{5\pi^2}{8\eta^2} \right)$$

Le nombre de particules dont le module de l'impulsion  $p$  est supérieur à  $p_F$  est par définition nul. Pour calculer le nombre de particules telles que  $p < p_F$ , nous pouvons reprendre le raisonnement de la section 2.8.1 en remplaçant la pondération de Fermi-Dirac par l'unité ( $\langle n_i \rangle = 1$  si  $p < p_F$ ). On trouve :

$$dN = gV \frac{4\pi p^2 dp}{h^3} \quad (2.9)$$

Le nombre total de particules est obtenu en intégrant l'expression précédente de 0 à  $p_F$  :

$$N = \int_0^{p_F} gV \frac{4\pi p^2 dp}{h^3} = g \frac{V}{h^3} \frac{4\pi}{3} p_F^3$$

ce qui donne :

$$p_F = h \left( \frac{3}{4\pi g} \right)^{1/3} \rho^{1/3} \quad (2.10)$$

Cette expression est valable pour tous les fermions, relativistes ou non.

Limitons nous, dans ce qui suit, aux fermions non relativistes. L'énergie de Fermi vaut explicitement :

$$E_F = \frac{p_F^2}{2m} = \frac{h^2}{2m} \left( \frac{3}{4\pi g} \right)^{2/3} \rho^{2/3} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{6\pi^2}{g} \right)^{2/3} \rho^{2/3} \quad (2.11)$$

(nous avons utilisé l'expression  $h = 2\pi\hbar$ ). Le nombre de particules  $dN$  dont le module de l'impulsion est compris entre  $p$  et  $p + dp$  est donné par l'équation (2.9) lorsque  $p \leq p_F$ . Il est nul lorsque  $p \geq p_F$ . Les particules d'impulsion  $p$  ont une énergie cinétique égale à  $\frac{p^2}{2m}$ . Le gaz étant supposé parfait, il n'a pas d'énergie potentielle et son énergie totale est égale à :

$$E = \frac{1}{2m} \int_0^{p_F} p^2 dN = \frac{2\pi g V}{mh^3} \int_0^{p_F} p^4 dp = \frac{2\pi g V}{mh^3} \frac{p_F^5}{5}$$

ce qui, compte tenu de l'équation (2.10), donne :

$$E = \frac{3}{5} \frac{h^2}{2m} \left( \frac{3}{4\pi g} \right)^{2/3} \rho^{5/3} V = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{6\pi^2}{g} \right)^{2/3} \rho^{5/3} V$$

Soit, en utilisant la définition (2.11) de l'énergie de Fermi :

$$E = \frac{3}{5} E_F N \quad \text{ou, pour l'énergie par particule} \quad \frac{E}{N} = \frac{3}{5} E_F$$

Au zéro absolu, l'énergie et la pression d'un gaz de fermions ne sont pas nulles. Cette propriété est due au principe d'exclusion de Pauli qui ne permet pas aux particules de se trouver toutes sur le niveau d'énergie le plus bas. Par conséquent, même à température nulle, les particules du gaz sont animées d'un mouvement appelé *mouvement de Fermi*. Comme l'énergie de Fermi  $E_F$  est proportionnelle à  $\rho^{2/3}$ , les particules seront d'autant plus rapides que le nombre de particules par unité de volume sera grand.

### 2.8.3 Gaz de Fermi à basse température

La plupart des quantités obtenues dans la section 2.8.1 sont exprimées en fonction des intégrales de Fermi  $I_\nu(\eta)$ . Il n'est pas possible de calculer celles-ci analytiquement.

Lorsque la température n'est pas trop élevée, *i.e.* si  $k_B T \ll E_F$ , on peut utiliser un développement limité pour  $I_\nu(\eta)$  qui permet d'obtenir des formules analytiques approchées qui en sont d'excellentes approximations (*cf.* note 7 et PS, section 9.1.4). On trouve :

$$\mu = E_F \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right]$$

et

$$E = \frac{3}{5} N E_F \left[ 1 + \frac{5\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right] \quad (2.7)$$

Par ailleurs,  $S = (\pi^2/2) N k_B (k_B T / E_F)$  ce qui confirme, pour les fermions, l'expression du troisième principe de la thermodynamique : l'entropie tend vers zéro lorsque la température tend vers zéro.

## EXERCICES

### Exercice 2.1

Calculer, à 300 K, la vitesse la plus probable  $\tilde{v}$ , la vitesse moyenne  $\langle v \rangle$  et la vitesse quadratique moyenne  $\sqrt{\langle v^2 \rangle}$  d'un gaz parfait constitué de molécules d'azote ( $N_2$ , masse molaire égale à 28 g)<sup>8</sup>.

### Exercice 2.2

Calculer l'énergie moyenne d'un électron libre à 300 K confiné dans un parallélépipède de côtés  $a$ ,  $b$  et  $c$  dans les trois cas suivants : 1)  $a = b = c = 1 \mu\text{m}$  ; 2)  $a = b = 1 \mu\text{m}$  et  $c = 1 \text{ nm}$  ; 3)  $a = 1 \mu\text{m}$  et  $b = c = 1 \text{ nm}$  ; 4)  $a = b = c = 1 \text{ nm}$

### Exercice 2.3

Le nombre d'électrons libres du cuivre est de  $8,5 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$ .

8. On utilisera les valeurs des intégrales :  $I_n = \int_0^\infty x^n e^{-ax^2} dx$  et  $J_n = \int_{-\infty}^{+\infty} x^n e^{-ax^2} dx$ . L'intégrale  $I_n$  peut être évaluée par récurrence :  $I_{n+2} = -\frac{\partial}{\partial a} I_n$  avec  $I_0 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$  et  $I_1 = \frac{1}{2a}$ . Par ailleurs,  $J_{2n+1} = 0$  et  $J_0 = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$ . On a  $I_2 = \frac{1}{4a} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$ ,  $I_3 = \frac{1}{2a^2}$ ,  $I_4 = \frac{3}{8a^2} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$  et  $I_5 = \frac{1}{a^3}$ .

1. Calculer, en J et en eV, l'énergie de Fermi  $E_F = \mu(T = 0)$ , la température de Fermi et la vitesse de Fermi.
2. Calculer la valeur du potentiel chimique à 300 K.
3. En supposant que le nombre d'électrons libres ne dépend pas de la température, calculer la pression du gaz d'électrons. À 300 K cette pression sera-t-elle plus faible ou plus forte ?

### Exercice 2.4

Calculer la densité d'états d'un gaz d'électrons à 3, 2 et 1 dimensions. En donner la valeur si  $E = 0,2$  eV.

- Exercice 2.5**
1. Calculer le nombre d'atomes de silicium,  $n$ , contenus dans un volume de  $1 \text{ cm}^3$ . On donne : masse atomique du Si  $\rightarrow A = 28,1 \text{ g}$  ; Masse volumique du Si  $\mu = 2,3 \text{ g/cm}^3$ . Nombre d'avogadro  $\mathcal{N} = 6,023 \times 10^{23}$ .
  2. Sachant que tous les atomes dans  $1 \text{ cm}^3$  sont couplés entre-eux, en combien de niveaux le niveau supérieur de chaque atome va-t-il se décomposer ? Que va-t-on former ?
  3. En supposant que la largeur d'une bande est de l'ordre de  $1 \text{ eV}$ , calculer l'espacement moyen  $\delta E$  entre deux niveaux de cette bande. Conclusion
  4. Calculer l'énergie d'agitation thermique moyenne à  $T = 25^\circ \text{C}$  et comparer celle-ci à l'espacement des niveaux précédemment trouvés. On donne pour la constante de Boltzmann  $k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ . Calculer cette constante en eV/K.
  5. Supposons que l'on veuille mesurer l'énergie d'un niveau du cristal et que la mesure prenne  $1 \text{ s}$ . Quelle serait l'incertitude sur l'énergie ?

## CORRIGÉS

### Exercice 2.1

La distribution de vitesse est une distribution de Maxwell :

$$f(\mathbf{v}) = C \exp(-m\mathbf{v}^2/k_B T),$$

où  $C = \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2}$  est une constante. Si  $\int f(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = 1$ , la quantité  $f(\mathbf{v}) d\mathbf{v}$  représente la probabilité pour que la vitesse d'une molécule soit comprise entre  $\mathbf{v}$  et  $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$ . La probabilité pour que le module de la vitesse des particules soit compris entre  $v$  et  $v + dv$  est  $g(v) dv$ , où  $g(v) dv = 4\pi v^2 f(\mathbf{v}) dv$ .

La vitesse la plus probable correspond à  $\frac{dg(v)}{dv} = 0$ . On trouve  $\tilde{v} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}$ .

La vitesse moyenne vaut :

$$\langle v \rangle = \int_0^\infty v g(v) dv = 4\pi \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \int_0^\infty v^3 \exp(-mv^2/k_B T) dv$$

Ce qui donne  $\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}}$ .

On peut calculer la vitesse quadratique moyenne de deux manières différentes :

Soit directement avec :

$$\langle v^2 \rangle = \int_0^\infty v^2 g(v) dv = 4\pi \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \int_0^\infty v^4 \exp(-mv^2/k_B T) dv$$

On trouve  $\langle v^2 \rangle = \frac{3k_B T}{m}$ .

Soit en utilisant le théorème d'équipartition de l'énergie. On a

$$\frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle = 3 \times \frac{1}{2} k_B T.$$

La masse d'une molécule d'azote est  $\frac{28 \times 10^{-3}}{N} = 4,65 \times 10^{-26}$  kg.

Comme  $k_B T = 4,14 \times 10^{-21}$  J, on en déduit :

$$\tilde{v} = 422 \text{ m/s}, \quad \langle v \rangle = 476,7 \text{ m/s} \quad \text{et} \quad \sqrt{\langle v^2 \rangle} = 516,8 \text{ m/s}.$$

## Exercice 2.2

1. Nous avons vu, dans l'exercice 3 du chapitre 1 que l'énergie d'un électron dans une boîte cubique de  $1 \mu\text{m}$  de côté vaut  $1,12 \mu\text{eV}$ . Elle est négligeable devant l'énergie thermique,  $k_B T = 0,026 \text{ eV}$ . Par conséquent, le système a un comportement classique. On peut utiliser le théorème d'équipartition de l'énergie pour calculer l'énergie moyenne. On a  $E = \frac{3}{2} k_B T = 0,039 \text{ eV}$ .

2. Pour un électron confiné entre deux murs infinis séparés de  $L = 1 \text{ nm}$ , l'énergie du fondamental vaut  $\varepsilon = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = 0,6 \times 10^{-19} \text{ J} = 0,37 \text{ eV}$ . Cette énergie est bien plus grande que l'énergie thermique  $k_B T = 0,026 \text{ eV}$ . Par conséquent, le théorème d'équipartition de l'énergie n'est pas valable dans cette direction. On peut, par contre, l'appliquer aux deux autres. On trouve

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} + k_B T = 0,4 \text{ eV}.$$

3. Le théorème d'équipartition ne s'applique que dans une direction. On a

$$E = \frac{2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} + \frac{1}{2}k_B T = 0,75 \text{ eV}.$$

4. Le théorème d'équipartition ne s'applique plus. On a  $E = \frac{3\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = 1,1 \text{ eV}$ .

Lorsqu'au moins une des dimensions est égale à 1 nm, on voit que la contribution essentielle à l'énergie provient du mouvement de point zéro qui est d'origine quantique.

### Exercice 2.3

1. Pour des électrons dont le spin est  $\frac{\hbar}{2}$ , l'énergie de Fermi est donnée par :

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2\rho)^{2/3}$$

où  $\rho$  est le nombre d'électrons par unité de volume. Nous avons dans notre cas :

$$E_F = \frac{(1,05 \times 10^{-34})^2}{2 \times 9,1 \times 10^{-31}} [3\pi^2 (8,5 \times 10^{28})]^{2/3} = 1,12 \times 10^{-18} \text{ J} = 7 \text{ eV}$$

La température de Fermi vaut  $T_F = \frac{E_F}{k_B} = 8,12 \times 10^4 \text{ K}$  et la vitesse de Fermi est donnée par :

$$v_F = \frac{\hbar}{m} (3\pi^2\rho)^{1/3} = 1,57 \times 10^6 \text{ m/s}$$

2. En utilisant l'équation 2.12, on trouve :

$$\mu = E_F \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right] = 7 \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{0,026}{7} \right)^2 \right] \simeq E_F$$

car  $T_F \gg T$ .

3. L'équation d'état d'un gaz parfait d'électrons est  $PV = \frac{2}{3}E$ .

Comme  $E = \frac{3}{5}N E_F$ , nous avons :

$$P = \frac{2}{3} \frac{E}{V} = \frac{2}{5} E_F \rho = 8,8 \times 10^{10} \text{ Pascals}$$

A la température  $T$ , la pression est donnée, si  $T_F > T$ , par :

$$P = \frac{2}{5} E_F \rho \left[ 1 + \frac{5\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right]$$

Comme  $T_F \gg T$ , la pression est pratiquement la même à 300 K qu'à 0 K.

### Exercice 2.4

Les densités d'états d'un gaz d'électrons libres à 3D, 2D et 1D sont donnés dans la section 6.5.

Dans l'espace à 3 dimensions on a :

$$\rho(E) = \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{E} = 1,07 \times 10^{56}\sqrt{E} \text{ J}^{-1}\text{m}^{-3}$$

Si  $E$  est exprimée en eV et le volume en  $\text{cm}^{-3}$ , ceci s'écrit :

$$\begin{aligned}\rho(E) &= 1,07 \times 10^{56}\sqrt{E(\text{J})}\text{J}^{-1}\text{m}^{-3} \\ &= 1,07 \times 10^{56}\sqrt{E(\text{eV})} \times \left( \sqrt{1,6 \times 10^{-19}} \times \frac{1}{1,6 \times 10^{-19} \times 10^6} \right) \text{eV}^{-1}\text{cm}^{-3} \\ &= 6,85 \times 10^{21}\sqrt{E(\text{eV})}\text{eV}^{-1}\text{cm}^{-3}\end{aligned}$$

Ceci donne, pour  $E = 0,2 \text{ eV}$ ,  $\rho(E) = 3 \times 10^{21} \text{ eV}^{-1}\text{cm}^{-3}$ .

A 2 dimensions, la densité de niveau est indépendante de l'énergie :

$$\rho(E) = \frac{m}{\pi\hbar^2} = 4,2 \times 10^{14} \text{ eV}^{-1}\text{cm}^{-2}$$

L'évaluation numérique peut, à titre d'exercice, être faite en utilisant le fait que  $\hbar c = 197 \text{ MeV}\cdot\text{fm}$  et que  $mc^2 = 0,511 \text{ MeV}$ . On trouve  $\rho(E) = 4,2 \times 10^{-6} \text{ MeV}^{-1}\text{fm}^{-2}$ . Comme  $1 \text{ MeV} = 10^6 \text{ eV}$  et  $1 \text{ fm} = 10^{-8} \text{ cm}$ , on en déduit le résultat ci-dessus.

A une dimension :

$$\begin{aligned}\rho(E) &= \frac{\sqrt{2}m}{\pi\hbar} \frac{1}{\sqrt{E}} = 4,1 \times 10^{18} \frac{1}{\sqrt{E}} \text{ J}^{-1}\text{m}^{-1} \\ &= 1,64 \times 10^7 \frac{1}{\sqrt{E(\text{eV})}} \text{ eV}^{-1}\text{cm}^{-2}\end{aligned}$$

Pour notre exemple, nous avons  $\rho(E) = 3,67 \times 10^7 \text{ eV}^{-1}\text{cm}^{-2}$ .

### Exercice 2.5

1. Masse de  $1 \text{ cm}^3$  de Si  $m = 2,3\text{g}$ . Nombre de mole  $\frac{m}{\mu} = \frac{2,3}{28,1} = 0,0819$ . Nombre d'atomes de Si  $n = \mathcal{N} \frac{m}{\mu} = 4,93 \times 10^{22} \text{ atomes/cm}^3$

2. Si l'on considère  $4,93 \times 10^{22}$  atomes, chaque niveau supérieur va se coupler avec les autres pour donner  $4,93 \times 10^{22}$  niveaux qui vont être très proches les uns des autres : on va créer une bande.



3. On a  $\delta E = \frac{1 \text{ eV}}{n} \simeq 2 \times 10^{-23} \text{ eV}$ . C'est si faible que la bande paraît continue.

4.  $k_B = 8,625 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$ . l'énergie d'agitation thermique vaut

$$k_B T = 2,57 \times 10^{-2} \text{ eV} \gg \delta E.$$

5.  $\Delta E \times \Delta t \simeq \hbar$ .  $\Delta E \simeq 1,055 \times 10^{-34} \text{ J} \implies \Delta E \simeq 0,66 \times 10^{-15} \text{ eV} \gg \delta E$ .

## Chapitre 3

---

# Structure cristalline

Un cristal est un arrangement périodique tridimensionnel d'atomes. Cette structure conduit à des propriétés physiques particulières par rapport à l'atome ; la conductivité électrique ou thermique d'un métal en sont un exemple. En physique, on utilise des modèles pour décrire la réalité. Ceux-ci doivent être raffinés au fur et à mesure que l'on a une connaissance plus précise du système et des phénomènes que l'on veut décrire. Pour l'étude des édifices cristallins, le *cristal idéal* sert de modèle de base pour aborder cette réalité.

### 3.1 LE CRISTAL IDÉAL

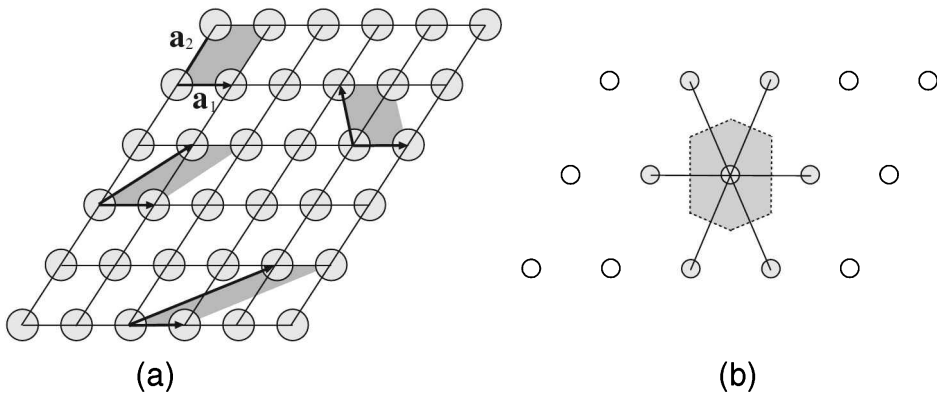
Un cristal idéal est une répétition *infinie* de motifs élémentaires dans l'espace. Ce motif peut être un atome ou un ensemble plus complexe. Cette structure périodique infinie implique une invariance par translation. Un cristal idéal est défini à partir d'un *réseau* et d'un *motif*.

Un *réseau* est un arrangement périodique de points dans l'espace qui se déduisent les uns des autres par translation discrète ; c'est un objet mathématique. Dans l'espace tridimensionnel, on le définit grâce à trois vecteurs indépendants  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  et  $\mathbf{a}_3$  qui repèrent 3 directions de translation indépendantes. Le vecteur de translation le plus général s'écrit :

$$\mathbf{T} = u_1\mathbf{a}_1 + u_2\mathbf{a}_2 + u_3\mathbf{a}_3 \quad (3.1)$$

où  $u_1$ ,  $u_2$  et  $u_3$  sont 3 nombres entiers négatifs, positifs ou nuls. Les vecteurs  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  et  $\mathbf{a}_3$  ne sont pas quelconques. Ils sont tels que deux points  $\mathbf{r}$  et  $\mathbf{r}'$  reliés par  $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{T}$  ont le même voisinage atomique. Les points du réseau sont appelés les *nœuds*. Tous les nœuds se déduisent de l'un d'entre-eux par une translation  $\mathbf{T}$ . L'ensemble des points, appelé *réseau de Bravais*, est obtenu en faisant varier les nombres entiers  $u_1$ ,  $u_2$  et

$u_3$  de  $-\infty$  à  $+\infty$ . Les vecteurs  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  et  $\mathbf{a}_3$  sont dits *primitifs*. L'ensemble  $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$  définit un volume élémentaire qui, si on lui applique toutes les translations possibles  $\mathbf{T}$ , remplit tout l'espace : c'est la *maille élémentaire* (ou *maille primitive*). Le volume élémentaire est égal au produit mixte  $|\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3| = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \wedge \mathbf{a}_3)$  des vecteurs primitifs. Les choix de  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  et  $\mathbf{a}_3$  et de la maille élémentaire ne sont pas uniques. Ceci est illustré dans la figure 3.1 (a) qui montre, pour un espace à deux dimensions, quatre choix différents mais tout aussi valables (les mailles élémentaires sont en grisé).



**Figure 3.1** (a) Exemple de maille élémentaire pour un réseau à deux dimensions. (b) Maille de Wigner-Seitz.

Le choix de la maille élémentaire est souvent évident mais il est un cas où cela l'est moins. Il s'agit de la *maille de Wigner-Seitz* qui est construite en utilisant les plans médians de tous les segments qui relient un nœud particulier à tous ses voisins (ceci est illustré, pour un réseau bidimensionnel, dans la figure 3.1 (b)). La maille de Wigner-Seitz est le plus petit volume (surface ici) enfermé par ces plans médiateurs. Elle est représentée en grisé dans la figure 3.1 (b).

Le cristal idéal est obtenu en associant à chaque point du réseau de Bravais les entités qui constituent le cristal (atomes, ions, molécules, *etc.*). Celles-ci sont disposées de façon qu'elles aient toutes le même environnement atomique et, en particulier, la même orientation. C'est ce que l'on peut appeler le *motif*. Le *cristal idéal* est l'association d'un *réseau* et d'un *motif*.

## 3.2 RÉSEAUX CRISTALLINS

Les symétries jouent un rôle important dans l'étude des cristaux car leur structure est périodique. Les opérations simples sont : les translations, les rotations, les réflexions par rapport à un plan et les symétries par rapport à un point (inversion). À partir de celles-ci, on peut bâtir des opérations composées d'un produit de celles-ci.

Certaines opérations de symétrie peuvent laisser le réseau de Bravais invariant, mais pas la base ; c'est le cas de certaines translations appliquées à des cristaux composés de plusieurs atomes. Les symétries de la base doivent donc être compatibles avec celles du réseau primitif ce qui réduit notablement le nombre de structures cristallines possibles pour un solide donné.

### 3.2.1 Réseaux directs

On classe les réseaux selon leur type de symétrie. Ceci conduit à des familles dont le nombre dépend de la dimensionnalité de l'espace considéré. Il n'existe qu'un seul type de réseau à une dimension : des points régulièrement espacés sur une droite. Néanmoins, le nombre de réseaux de ce type est infini puisque la distance peut, en principe, prendre n'importe quelle valeur.

#### a) Réseaux bidimensionnels

Il y a cinq types de réseaux de Bravais à deux dimensions. Le plus général correspond au réseau oblique pour lequel  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  et l'angle  $\alpha$  entre  $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$  sont quelconques ( $\mathbf{a}_1 \neq \mathbf{a}_2$ ,  $\alpha$  quelconque). Les autres types correspondent à des restrictions associées aux rotations de  $\frac{2\pi}{2} = \pi$ ,  $\frac{2\pi}{3}$ ,  $\frac{2\pi}{4} = \frac{\pi}{2}$  et  $\frac{2\pi}{6}$  qui sont les seules possibles. En effet, une rotation de  $\frac{2\pi}{5}$ , par exemple, n'est pas possible (on ne peut pas paver un plan avec des pentagones)<sup>1</sup>.

#### b) Réseaux tridimensionnels

Les propriétés de symétrie, déjà évoquées pour les réseaux bidimensionnels, conduisent ici à 14 types de réseaux différents. Il est d'usage de les grouper en 7 familles selon les propriétés de la maille élémentaire. Le réseau le plus général, donc le moins symétrique, est le *réseau triclinique* dans lequel les longueurs de la maille sont toutes différentes ( $a_1 \neq a_2 \neq a_3$ )<sup>2</sup> et les angles entre ces vecteurs pris deux à deux –  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$  – tous différents ( $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ ). Les familles possibles sont résumées dans la table 3.1.

Pour le réseau cubique, qui présente un intérêt particulier pour les semi-conducteurs, il existe 3 réseaux de Bravais : le réseau cubique primitif, le réseau cubique centré et le réseau cubique à faces centrées. Il est intéressant de donner les composantes des vecteurs primitifs selon un système d'axes cartésiens. Supposons pour cela que l'un

1. En 1984, des grains quasi-cristallins constitués d'un arrangement d'atomes admettant des axes de rotation d'ordre 5 ont été découverts. Il s'agit des *quasi-cristaux*. Ce ne sont pas des structures périodiques bien qu'ils présentent des spectres de diffraction ressemblant à ceux des cristaux. Ils sont généralement obtenus par trempe rapide d'alliages à base d'aluminium et de métaux comme le manganèse, le fer ou le cuivre.

2.  $a_i$  est le module du vecteur  $\mathbf{a}_i$ .

**Tableau 3.1** Familles des réseaux à trois dimensions.

Famille	Nombre de réseaux de Bravais	Propriétés des longueurs et des angles de la cellule élémentaire
Triclinique	1	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ et $\alpha \neq \beta \neq \gamma$
Monoclinique	2	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ et $\alpha = \gamma = \pi/2 \neq \beta$
Orthorhombique	4	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ et $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$
Tétragonal	2	$a_1 = a_2 \neq a_3$ et $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$
Hexagonal	1	$a_1 = a_2 \neq a_3$ et $\alpha = \beta = \pi/2$ ; $\gamma = 4\pi/3$
Trigonal	1	$a_1 = a_2 = a_3$ et $\alpha = \beta = \gamma < 4\pi/3$ mais $\neq \pi/2$
Cubique	3	$a_1 = a_2 = a_3$ et $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$

des sommets du cube de côté  $a$  soit situé à l'origine du système de coordonnées et plaçons le sommet opposé selon la plus grande diagonale aux coordonnées  $(a, a, a)$ . Il est alors possible de choisir un système de vecteurs primitifs dont les composantes selon ce système d'axes sont indiquées dans le tableau (3.2) pour les différents réseaux cubiques cités plus haut.

**Tableau 3.2** Composantes des vecteurs primitifs des réseaux cubique simple, cubique centré et cubique faces centrées pour un cube de côté  $a$ .

Type de réseau	$\mathbf{a}_1$	$\mathbf{a}_2$	$\mathbf{a}_3$
Cubique simple	$a, 0, 0$	$0, a, 0$	$0, 0, a$
Cubique centré	$\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, -\frac{a}{2}$	$-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}$	$\frac{a}{2}, -\frac{a}{2}, \frac{a}{2}$
Cubique à faces centrées	$\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, 0$	$0, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}$	$\frac{a}{2}, 0, \frac{a}{2}$

Le réseau de Bravais du cristal de silicium ou d'arséniure de gallium ( $AsGa$ ) est constitué de deux réseaux cubiques à faces centrées imbriqués. La maille élémentaire est formée de deux atomes situés aux coordonnées  $(0, 0, 0)$  et  $(\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{a}{4})$ . Dans le cas du silicium les deux atomes sont identiques ; dans le cas de l' $AsGa$ , il s'agit de deux atomes différents, l'un d'arsenic, l'autre de gallium.

La plupart des solides contiennent  $10^{28}$ – $10^{29}$  atomes/m<sup>3</sup> mais la structure cristalline d'un composé peut changer avec la température. C'est le cas, par exemple, du cristal de  $BaTiO_3$  qui passe d'un système trigonal (appelé aussi parfois rhomboédrique) à  $-90$  °C, à un système tétragonal à  $0$  °C, puis à un système cubique à  $130$  °C. Au cours

de ces transformations, les vecteurs de base varient de moins de 0,3 %. C'est aussi le cas du plutonium qui présente de nombreuses formes cristallines selon les conditions physiques<sup>3</sup>.

### 3.2.2 Le réseau réciproque

Pour obtenir des informations sur la structure d'un cristal, il faut utiliser une interaction entre celui-ci et une sonde extérieure. Cette sonde est souvent un rayonnement électromagnétique (photons) ou un faisceau de particules (électrons, neutrons). Le phénomène de diffraction ne donne un signal mesurable que si la longueur d'onde du rayonnement est de l'ordre du pas du réseau, typiquement de quelques Å ( $1 \text{ Å} = 0,1 \text{ nm} = 10^{-10} \text{ m}$ ) à quelques dizaines d'Å. L'interaction des rayons  $X$  et des électrons avec le cristal est de nature électromagnétique ; celle des neutrons est de type nucléaire. Il peut également y avoir une interaction électromagnétique entre le moment magnétique du neutron et celui des atomes, ce qui est fort utile pour étudier les matériaux magnétiques.

La diffraction par rayons  $X$  est de loin la méthode la plus utilisée pour étudier une structure cristalline. Les rayons  $X$  sont diffusés par la densité électronique  $\rho(\mathbf{r})$ . Cette dernière possède la même symétrie que le cristal. Par conséquent, elle est invariante par rapport à toute translation du type (3.1)  $\rho(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = \rho(\mathbf{r})$ .

La notion de *réseau réciproque* est très utile pour interpréter les spectres de diffraction. Pour introduire cette notion, plaçons-nous d'abord dans l'hypothèse d'un modèle à une dimension. Un réseau est alors une suite de points régulièrement espacés sur une droite. Soit  $a$  le pas du réseau. Toute fonction périodique  $f(x)$ , de période  $a$ , peut être développée en série de Fourier :

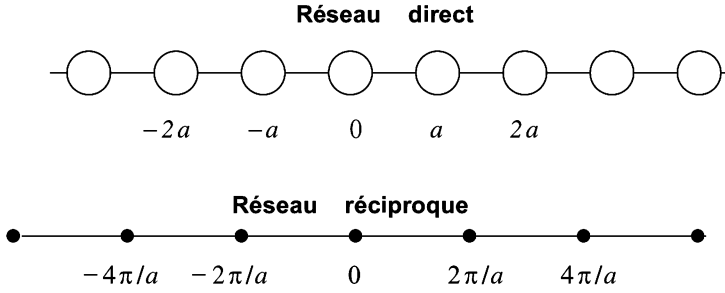
$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} C_n \exp\left(i \frac{2\pi n x}{a}\right) \quad (3.2)$$

où  $n$  est un nombre entier. L'ensemble des points  $\frac{2\pi n}{a}$ , pour  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  est un réseau linéaire de points régulièrement espacés de la quantité  $\frac{2\pi}{a}$  que l'on appelle le *réseau réciproque*. Ceci est illustré dans la figure 3.2.

La généralisation du développement (3.2) à un réseau tridimensionnel de vecteurs de base  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  et  $\mathbf{a}_3$  pour une fonction périodique  $f(\mathbf{r})$  invariante dans les translations  $\mathbf{T}$  est :

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{G}} \exp(i \mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \quad (3.3)$$

3. Le plutonium peut avoir 8 formes cristallines différentes. Six d'entre-elles, dénommées  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$ ,  $\delta'$  et  $\epsilon$ , se rencontrent entre 395 K et 752 K. La septième, hexagonale, apparaît lorsque la pression est supérieure à 400 GPa ; la huitième à haute pression et haute température. Les variations dimensionnelles que l'on peut observer sont exceptionnelles. Ainsi la forme  $\delta$  (cubique à faces centrées) est 25 % moins dense que la forme  $\alpha$  (monoclinique). Cette dernière se dilate, selon l'un de ses axes, huit fois plus que le fer.



**Figure 3.2** Réseaux direct et réciproque à une dimension.

Les vecteurs  $\mathbf{G}$  appartiennent à l'espace réciproque et définissent le réseau réciproque. Ils doivent satisfaire à la condition :

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{T} = 2\pi n \quad (3.4)$$

où  $n$  est un nombre entier ( $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ).

En effet,  $f(\mathbf{r})$  est invariant pour toute translation  $\mathbf{T}$ , soit  $f(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = f(\mathbf{r})$ . Ceci se traduit, en utilisant (3.3), par :

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{G}} \exp[i\mathbf{G} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{T})] = \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \times \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}) = f(\mathbf{r})$$

ce qui conduit à la relation (3.4).

Si  $\mathbf{A}_1$ ,  $\mathbf{A}_2$  et  $\mathbf{A}_3$  sont les vecteurs de base du réseau réciproque, tout vecteur  $\mathbf{G}$  peut s'écrire sous la forme  $\mathbf{G} = h_1\mathbf{A}_1 + h_2\mathbf{A}_2 + h_3\mathbf{A}_3$ . Si l'on choisit les vecteurs primitifs  $\mathbf{A}_i$  du réseau réciproque tels qu'ils soient orthogonaux aux vecteurs  $\mathbf{a}_j$  ( $j \neq i$ ) et que leur projection le long de  $\mathbf{a}_i$  soit de longueur  $2\pi$ , on obtient les relations :

$$\mathbf{A}_i \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (3.5)$$

où  $\delta_{ij}$  est le symbole de Kronecker ( $\delta_{ij} = 0$  si  $i \neq j$  et  $\delta_{ij} = 1$  si  $i = j$ ). Pour que la relation (3.4) soit satisfaite, il suffit alors que  $h_1u_1 + h_2u_2 + h_3u_3$  soit un entier. La relation (3.5) permet de définir les vecteurs primitifs du réseau réciproque à partir de ceux du réseau direct. En effet, les vecteurs perpendiculaires à deux vecteurs donnés sont proportionnels au produit vectoriel de ceux-ci d'où :

$$\mathbf{A}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \wedge \mathbf{a}_3}{|\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3|}, \quad \mathbf{A}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \wedge \mathbf{a}_1}{|\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3|} \quad \text{et} \quad \mathbf{A}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \wedge \mathbf{a}_2}{|\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3|} \quad (3.6)$$

où,  $|\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3| = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \wedge \mathbf{a}_3)$  représente le produit mixte des trois vecteurs  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  et  $\mathbf{a}_3$  ; c'est le volume du parallélépipède construit sur ces trois vecteurs. Sa présence,

dans l'expression ci-dessus, permet d'assurer que la norme des vecteurs  $\mathbf{A}_i$  soit égale à  $2\pi$ .

Le volume,  $V_{\text{el}}^*$ , d'une cellule élémentaire du réseau réciproque est inversement proportionnel à celui,  $V_{\text{el}}$ , d'une cellule élémentaire du réseau direct. En effet  $V_{\text{el}}^* = \mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{A}_2 \wedge \mathbf{A}_3 = \frac{(2\pi)^3}{|\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3|^3} = \frac{8\pi^3}{V_{\text{el}}}$ . Le réseau direct est le réseau réciproque de son propre réseau réciproque. En effet, nous avons par exemple :

$$\mathbf{a}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{A}_1 \wedge \mathbf{A}_2}{\mathbf{A}_1 \cdot (\mathbf{A}_2 \wedge \mathbf{A}_3)}.$$

Revenons aux réseaux cubiques dont nous avons donné les vecteurs primitifs dans la table (3.2). Dans le tableau (3.3) nous donnons les composantes des vecteurs primitifs des réseaux réciproques respectivement associés à ces différents réseaux. On pourra noter que les réseaux cubique centré et cubique faces centrées sont les réseaux réciproques l'un de l'autre.

**Tableau 3.3** Composantes des vecteurs primitifs des réseaux réciproques cubique simple, cubique centré et cubique faces centrées (cube de côté  $a$ ).

Réseau d'origine	$\mathbf{A}_1$	$\mathbf{A}_2$	$\mathbf{A}_3$
cubique simple	$\frac{2\pi}{a}, 0, 0$	$0, \frac{2\pi}{a}, 0$	$0, 0, \frac{2\pi}{a}$
cubique centré	$\frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{a}, 0$	$0, \frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{a}$	$\frac{2\pi}{a}, 0, \frac{2\pi}{a}$
cubique à faces centrées	$\frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{a}, -\frac{2\pi}{a}$	$-\frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{a}$	$\frac{2\pi}{a}, -\frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{a}$

### 3.2.3 Les indices de Miller

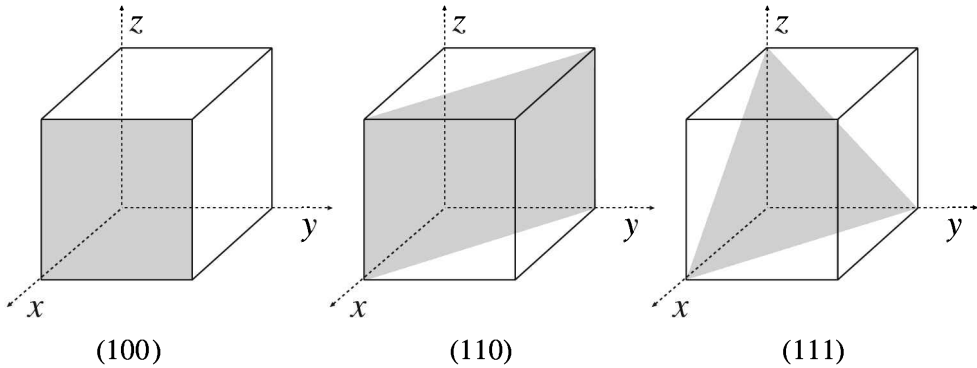
Les nœuds d'un réseau cristallin définissent des familles de plans parallèles appelé *plans réticulaires*. Il y a plusieurs façons possibles de grouper les nœuds du réseau en familles de plans parallèles. La position d'un plan réticulaire peut être donnée par les abscisses  $x_1$ ,  $x_2$  et  $x_3$  des trois points d'intersection de ce plan avec les axes repérant le cristal. Si l'on exprime ces abscisses en fonction des paramètres de la maille  $a_1$ ,  $a_2$  et  $a_3$ , on définit ainsi 3 coordonnées sans dimension  $u_1 = x_1/a_1$ ,  $u_2 = x_2/a_2$  et  $u_3 = x_3/a_3$ . Au lieu d'utiliser les nombres  $u_1$ ,  $u_2$  et  $u_3$  pour définir le plan, on prend leurs inverses multipliés par le plus petit facteur commun qui les rend entiers. Ceci revient à ramener les inverses de  $u_1$ ,  $u_2$  et  $u_3$  aux trois plus petits entiers proportionnels. Les trois nombres entiers  $h_1$ ,  $h_2$  et  $h_3$  obtenus sont appelés les *indices de Miller* et notés ( $h_1 h_2 h_3$ ). Pour un réseau cubique, on a  $u_1 = 4$ ,  $u_2 = 1$  et  $u_3 = 2$  pour un plan qui coupe les axes cartésiens  $Ox$ ,  $Oy$  et  $Oz$  en  $4a$ ,  $a$  et  $2a$ . Les indices de Miller associés à ce plan sont alors (142).

Lorsqu'un plan est parallèle à un axe du référentiel, l'intersection se fait à l'infini et l'indice de Miller correspondant est nul. Ainsi, les indices de Miller du plan perpendiculaire à la direction  $\mathbf{a}_1$  coupant l'axe  $Ox$  en  $a$  sont (100).



Si la coordonnée d'intersection est négative, l'indice de Miller négatif ; il est d'usage d'indiquer le signe en surlignant l'indice correspondant. Ainsi  $(h_1 - h_2 h_3)$  est noté  $(h_1 \overline{h_2} h_3)$ . Pour le plan coupant les axes cartésiens  $Ox$ ,  $Oy$  et  $Oz$  en  $a$ ,  $-2a$  et  $4a$ , on a  $u_1 = 1$ ,  $u_2 = -2$  et  $u_3 = 4$ . Les indices de Miller associés à ce plan sont  $(4\overline{2}1)$ .

La figure 3.3 montre les indices de Miller de quelques plans particuliers d'un cube.



**Figure 3.3** Quelques indices de Miller pour un cube et les plans correspondants.

Les directions dans un cristal sont repérées par un système analogue qu'il ne faut pas confondre avec les indices de Miller. On définit les entiers  $h'_1$ ,  $h'_2$  et  $h'_3$  comme les plus petits entiers proportionnels aux cosinus des angles formés par la direction choisie et les axes de la maille. Cela signifie que les entiers  $h'_1$ ,  $h'_2$  et  $h'_3$  sont proportionnels aux composantes, sur les axes de la maille, d'un vecteur ayant la direction choisie. Ce triplet est habituellement noté  $[h'_1 h'_2 h'_3]$ . En général, la direction  $[h_1 h_2 h_3]$  n'est pas perpendiculaire au plan  $(h_1 h_2 h_3)$ . Ceci n'est vrai que dans certains cas particuliers comme le réseau cubique. Les plans équivalents par symétrie forment une famille que l'on désigne par le triplet  $\{h_1 h_2 h_3\}$ . Les directions parallèles à  $[h_1 h_2 h_3]$  sont notées  $\langle h_1 h_2 h_3 \rangle$ .

Considérons un réseau cubique puisque c'est celui qui nous intéressera dans le cas des semi-conducteurs. Dans ce cas, la direction  $[h_1 h_2 h_3]$  est perpendiculaire au plan  $(h_1 h_2 h_3)$ . Si les axes de coordonnées sont  $Ox$ ,  $Oy$  et  $Oz$ , l'équation du plan  $(h_1 h_2 h_3)$ , s'écrit :

$$h_1 x + h_2 y + h_3 z = C$$

où  $C$  est une constante. C'est le produit scalaire entre le vecteur de coordonnées  $(h_1, h_2, h_3)$ , perpendiculaire au plan, et le vecteur  $\mathbf{r}$  de coordonnées  $(x, y, z)$  dont l'extrémité est située dans le plan dont on cherche l'équation. Le vecteur unitaire,  $\mathbf{n}_{h_1 h_2 h_3}$ , normal à ce plan s'écrit :

$$\mathbf{n}_{h_1 h_2 h_3} = \frac{1}{(h_1^2 + h_2^2 + h_3^2)^{1/2}} (h_1 \mathbf{a}_1 + h_2 \mathbf{a}_2 + h_3 \mathbf{a}_3)$$

Le vecteur du réseau réciproque, que nous appellerons  $\mathbf{r}_{h_1h_2h_3}^*$ , qui va de l'origine au point  $(h_1, h_2, h_3)$ , s'écrit :

$$\mathbf{r}_{h_1h_2h_3}^* = h_1\mathbf{A}_1 + h_2\mathbf{A}_2 + h_3\mathbf{A}_3$$

À chaque vecteur  $\mathbf{r}_{h_1h_2h_3}^*$  de l'espace réciproque, il correspond un plan  $(h_1h_2h_3)$  de l'espace direct. En tenant compte de la relation (3.5) on en déduit :

- que chaque vecteur  $\mathbf{r}_{h_1h_2h_3}^*$  du réseau réciproque est perpendiculaire aux plans  $(h_1h_2h_3)$  du réseau direct.
- que la distance  $d_{h_1h_2h_3}$  entre deux plans voisins  $\{h_1h_2h_3\}$  du réseau direct est égale à :

$$d_{h_1h_2h_3} = \frac{2\pi}{|\mathbf{r}_{h_1h_2h_3}^*|}$$

### 3.2.4 Empilements compacts

Les réseaux cubiques faces centrées et hexagonaux peuvent s'interpréter en terme d'empilement compact d'atomes identiques. Supposons pour cela que chaque atome soit une sphère. Pour obtenir l'empilement le plus compact possible, commençons par disposer les sphères les unes contre les autres en perdant le moins de place possible. Ceci donne une couche, *A*, dont les centres des sphères forment un réseau de triangles équilatéraux (voir figure 3.4). On peut classer ces derniers en 2 familles : *B* ou *C*. Lorsque nous plaçons une deuxième couche de sphères sur la première, il y a deux possibilités pour placer les centres de celles-ci : les configurations *B* ou *C*. Le choix de l'une ou l'autre n'a pas grande importance et, pour un plan infini, elles sont identiques ; prenons *B*, par exemple. Pour la troisième couche nous avons le choix entre la mettre au-dessus de la première (configuration *A*) ou dans la configuration *C*. Ainsi, nous pouvons avoir des empilements de type *ABABAB...* ou *ABCABCABC...*. Dans le premier cas il s'agit du système *hexagonal compact* ; dans le second du système *cubique faces centrées*.

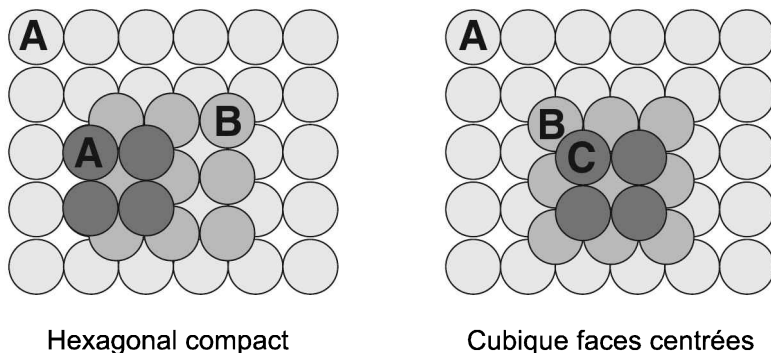


Figure 3.4 Empilements compacts.

### 3.2.5 Silicium et arséniure de gallium

Le silicium est le semi-conducteur le plus utilisé dans l'industrie électronique<sup>4</sup>. Il appartient à la quatrième colonne de la classification périodique et est tétravalent. Sa structure cristalline est tétraédrique et chaque atome de silicium est lié, par une liaison covalente, à quatre proches voisins situés à égale distance. Le cristal de silicium a la même structure cristalline que le diamant. On peut décrire son cristal comme deux réseaux cubiques à faces centrées (*cfc*), de maille  $a = 0,543$  nm, décalés l'un par rapport à l'autre d'une translation d'un quart de la grande diagonale le long de celle-ci.

Une autre manière de représenter le résultat de cette translation est de considérer le cube du réseau *cfc* (figure 3.5 (a)) et de le diviser en 8 cubes élémentaires ayant pour côté  $a/2$  (figure 3.5 (b)). Le centre de chaque petit cube (figure 3.5 (c)) définit un interstice tétraédrique. La superposition du second réseau *cfc* à celui que nous considérons ici se traduit par l'occupation de la moitié de ces interstices tétraédriques comme on peut le voir dans la figure (3.5 (b)). Dans celle-ci, nous avons distingué, en les représentant sous forme grisée, les 4 petits cubes contenant les interstices tétraédriques occupés par le silicium. Comme on peut le constater, pour les 4 petits cubes supérieurs, cela correspond à l'occupation de deux cubes en diagonale. Il en est de même pour les 4 petits cubes inférieurs à ceci près qu'il s'agit alors de l'autre diagonale.

L'arséniure de gallium fait partie de ce que l'on appelle les composés III–V car le gallium appartient à la colonne III de la classification périodique et l'arsenic à la colonne V. C'est un composé intéressant en optoélectronique car il est beaucoup plus efficace pour émettre de la lumière que le silicium<sup>5</sup>. L'arséniure de gallium est aussi utilisé pour réaliser des composants électroniques rapides, et dans le domaine des hyperfréquences. Il a une structure cristalline analogue à celle du silicium avec une maille  $a = 0,565$  nm. Il s'agit de la structure de la blende de zinc (forme cristalline du sulfure de zinc). Elle correspond à deux réseaux *cfc*, l'un contenant des atomes d'arsenic, l'autre des atomes de gallium, décalés l'un par rapport à l'autre le long de la grande diagonale d'un quart de celle-ci. Si l'on considère un réseau *cfc* d'arsenic, le gallium occupe quatre des huit interstices tétraédriques.

---

4. Le silicium est l'élément le plus abondant de la terre après l'oxygène. La croûte terrestre est constituée d'environ 30 % en masse de silicium sous forme de silicate (sable, quartz, granit, argile, mica, etc.). Le silicium est l'élément le plus utilisé en micro-électronique pour réaliser des composants (circuits intégrés, mémoires etc.). Néanmoins, la faible mobilité de ses porteurs et son gap indirect ne conviennent pas bien en optoélectronique ou en électronique rapide pour lesquelles on utilise plutôt des composés comme l'*AsGa*. Le grand intérêt du silicium provient de ce que son oxyde  $SiO_2$  qui est électriquement isolant, est stable chimiquement même à haute température. De plus, il permet de réaliser d'excellentes interfaces. Le couple semi-conducteur (*Si*)–isolant ( $SiO_2$ ) est particulièrement adapté à la réalisation de composants micro-électroniques.

5. Cela provient du fait que l'*AsGa* a un *gap direct* alors que le *Si* a un *gap indirect*.

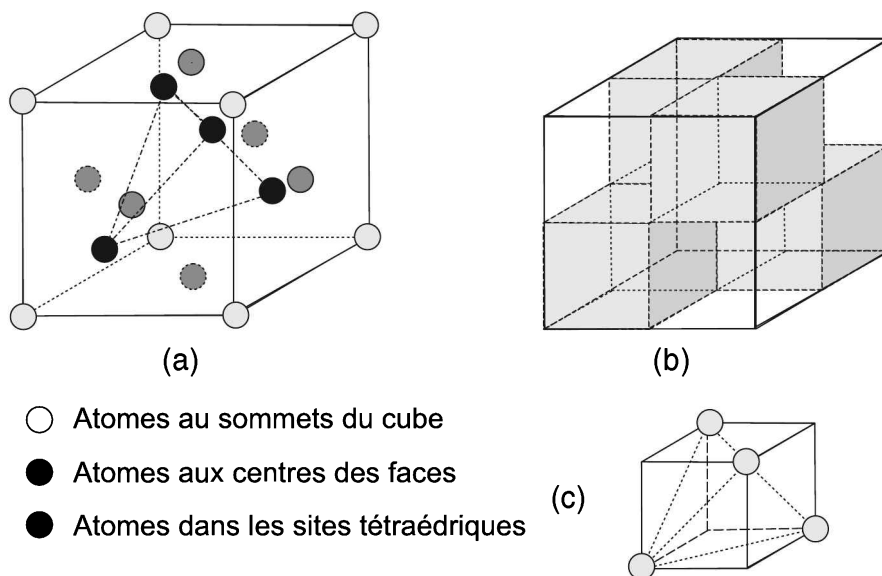


Figure 3.5 Interstices tétraédriques dans un réseau cubiques à faces centrées.

Certaines familles de plans réticulaires jouent un rôle important dans le cas du silicium et de l'arséniure de gallium. Il s'agit des familles de plans  $\{100\}$ ,  $\{110\}$  et  $\{111\}$ . Ils sont respectivement perpendiculaires aux directions  $[100]$ ,  $[110]$  et  $[111]$ . La direction  $[100]$  est parallèle au vecteur  $\mathbf{a}_1$  ; la direction  $[110]$  est perpendiculaire à  $\mathbf{a}_3$  et fait un angle de  $45^\circ$  avec  $\mathbf{a}_1$  et  $\mathbf{a}_2$  ; la direction  $[111]$  correspond à la grande diagonale du cube (bissectrice des vecteurs  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  et  $\mathbf{a}_3$ ). La nature du plan réticulaire qui constitue la surface du cristal,  $(100)$  ou  $(111)$  par exemple, a d'importantes conséquences pour les propriétés physiques et électroniques des matériaux semi-conducteurs.

La surface des plaquettes de silicium ou d'*AsGa* correspond habituellement à un plan  $(100)$  mais, pour certaines applications spécifiques, on trouve des plaquettes ayant une surface  $(111)$ . On peut cliver des plaquettes selon les plans réticulaires. Le silicium se clive facilement le long des plans  $\{111\}$  et l'*AsGa* selon les plans  $\{110\}$ .

### 3.3 DIFFRACTION PAR UN RÉSEAU CRISTALLIN

Une onde dont la longueur d'onde  $\lambda$  est de l'ordre de grandeur des paramètres du réseau ( $a_1, a_2, a_3$ ), est fortement diffractée par celui-ci. Pour les cristaux usuels, ceci correspond à des paramètres variant de quelques fractions de nm à quelques nm. Les

ondes les plus utilisées sont associées aux photons (rayons  $X$  ou photons de Bremsstrahlung d'énergie  $E$  pour lesquels on a  $\lambda \text{ (nm)} = 1,24/E \text{ (keV)}$ ), aux électrons ( $\lambda \text{ (nm)} = 1,2/E \text{ (eV)}$ ) et aux neutrons ( $\lambda \text{ (nm)} = 0,028/E \text{ (eV)}$ ); mais on pourrait tout aussi bien utiliser des atomes ou des noyaux d'énergie cinétique appropriée. Pour les photons et les électrons, l'interaction est de type électromagnétique. Elle est nucléaire pour les neutrons mais ces derniers sont aussi sensibles aux moments magnétiques orbitaux des électrons d'où l'intérêt de cette sonde pour l'étude des matériaux magnétiques.

Le phénomène de diffraction par un cristal se caractérise par une modification de l'onde incidente qui se traduit par une modulation de l'intensité de l'onde sortante. Lorsque celle-ci est mesurée, par un plan de détecteurs par exemple, on observe des maxima et des minima d'intensité. Si  $\mathbf{k}$  est le vecteur d'onde de l'onde incidente et  $\mathbf{k}'$  celui de l'onde diffractée, on peut montrer que l'intensité de diffraction est maximum lorsque :

$$\Delta \mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{G} \quad (3.7)$$

où  $\mathbf{G}$  est un vecteur du réseau réciproque. En fait, compte-tenu de la taille de l'échantillon généralement irradié, on peut dire, avec une excellente approximation, que l'on n'observe une intensité diffractée notable que si l'équation (3.7) est satisfaite.

### 3.3.1 Diffraction de Laue

Prenons le cas d'une diffusion élastique de rayons  $X$ . Il y a conservation de l'énergie lors de la diffusion élastique d'une onde électromagnétique de pulsation  $\omega$  et de vecteur d'onde  $\mathbf{k}$ . Soient respectivement  $\omega'$  et  $\mathbf{k}'$  la pulsation et le vecteur d'onde de l'onde diffractée. La conservation de l'énergie ( $\hbar \omega = \hbar \omega'$ ) se traduit par  $\omega = \omega'$ . La relation de dispersion d'une onde électromagnétique ( $\omega, \mathbf{k}$ ) dans le vide étant  $\omega = kc$ , où  $c$  est la vitesse de la lumière, on a  $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$ . La condition de diffraction (3.7) peut s'écrire sous la forme  $\mathbf{k} + \mathbf{G} = \mathbf{k}' \implies (\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 = \mathbf{k}'^2$ . Soit (puisque  $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$ ) :  $2\mathbf{k}\mathbf{G} + \mathbf{G}^2 = 0$ . Cette condition s'appelle la « condition de diffraction de Laue ». En remarquant que  $-\mathbf{G}$  est aussi un vecteur du réseau réciproque, on l'écrit souvent en faisant  $\mathbf{G} \rightarrow -\mathbf{G}$  dans l'équation précédente. On obtient :

$$2\mathbf{k}\mathbf{G} = \mathbf{G}^2 \quad (3.8)$$

La diffraction des rayons  $X$  est la méthode expérimentale la plus utilisée pour déterminer des structures cristallines. En effet, la figure de diffraction observée est un reflet des symétries du cristal et révèle la position moyenne des atomes les uns par rapport aux autres.

### 3.3.2 Diffraction de Bragg

En 1913, W.F. Bragg remarqua que, contrairement à un liquide, les rayons  $X$  réfléchis sur un cristal donnent, pour certaines longueurs d'ondes et certaines directions incidentes bien définies, des pics intenses de diffraction. Ces pics de diffraction, appelés *pics de Bragg*, sont le reflet de l'ordre et des symétries existant dans le cristal. Il en donna une explication simple, bien que peu rigoureuse, basée sur l'optique géométrique et sur la réflexion sur un plan.

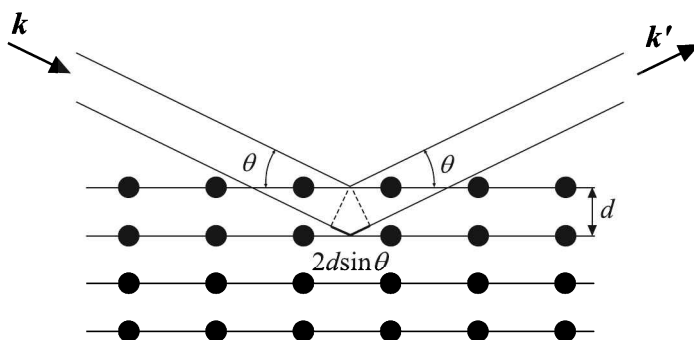


Figure 3.6 Diffraction de Bragg.

Considérons un rayonnement électromagnétique monochromatique, de longueur d'onde  $\lambda$ , réfléchi par une famille de plans réticulaires d'un cristal séparés par une distance  $d$  (figure 3.6). Soit  $\theta$  l'angle entre le vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  de l'onde incidente et un plan réticulaire. Après réflexion sur ce plan, le vecteur d'onde devient  $\mathbf{k}'$ . Pour une *réflexion spéculaire*, l'angle d'incidence est égal à l'angle de réflexion comme il est indiqué sur la figure. Pour observer un maximum dans l'intensité diffractée, il faut qu'il y ait interférences constructives entre les ondes réfléchies par les différents plans réticulaires de la famille considérée. Pour deux plans voisins, la différence de marche entre les deux ondes vaut  $2d \sin \theta$ . Celle-ci doit être un multiple de la longueur d'onde pour qu'il y ait interférences constructives.

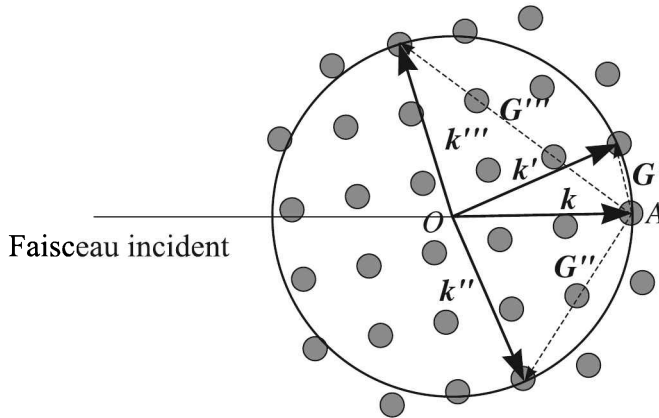
Ceci conduit à la condition de *Bragg* :

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

#### a) Construction d'Ewald

Tout comme le réseau direct, le réseau réciproque est un ensemble de points. Un vecteur  $\mathbf{G}$  est obtenu en joignant, de façon orientée, deux quelconques de ces points. Nous allons maintenant donner une interprétation géométrique de la condition de diffraction (3.8). Celle-ci est représentée schématiquement dans la figure 3.7. Le vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  est défini dans le réseau réciproque. Considérons un point  $A$  quelconque du réseau réciproque et plaçons l'extrémité de  $\mathbf{k}$  en ce point. Son origine sera en  $O$ , point qui n'est

pas nécessairement un point du réseau réciproque. Le vecteur  $\mathbf{k}$  définit une direction, celle du faisceau de photons incidents. La diffusion étant élastique,  $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$ . Le lieu de l'extrémité du vecteur d'onde  $\mathbf{k}'$  de l'onde diffusée se trouve sur la sphère centrée en  $O$  appelée « *sphère d'Ewald* ». Les points qui satisfont à la relation de diffraction sont ceux situés sur cette sphère. Ils constituent un ensemble de vecteurs  $\mathbf{G}_i$  ayant pour origine  $A$  et pour extrémité le point considéré sur la sphère d'Ewald. Ce sont ces vecteurs  $\mathbf{G}_i$  qui déterminent les réflexions de rayons  $X$  possibles.



**Figure 3.7** La sphère d'Ewald est illustrée à deux dimensions. L'onde incidente de vecteur  $\mathbf{k}$  peut être diffractée et donner, dans cet exemple, les ondes associées à  $\mathbf{k}'$ ,  $\mathbf{k}''$  et  $\mathbf{k}'''$ . Les moments transférés au cours de ces diffractions sont, respectivement,  $\hbar\mathbf{G}'$ ,  $\hbar\mathbf{G}''$  et  $\hbar\mathbf{G}'''$ .

### b) Diffraction de Laue et réflexion de Bragg

Nous allons maintenant montrer que la condition de Laue (3.8) permet de retrouver la condition de diffraction de Bragg. Pour cela, plaçons le vecteur de l'onde réfléchie,  $\mathbf{k}'$ , de telle manière que son origine coïncide avec l'extrémité de celle du vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  de l'onde incidente (ceci est illustré à deux dimensions dans la figure 3.8). La condition de Laue stipule que le vecteur  $\mathbf{G} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$  est un vecteur du réseau réciproque. Si  $k = k'$ , comme c'est le cas pour une diffusion élastique, la figure 3.8 montre qu'il est possible d'interpréter la diffraction comme une réflexion sur le plan médian de  $\mathbf{G}$ . Ce plan est appelé *plan de Bragg*. Si l'on raisonne maintenant dans l'espace direct, le vecteur  $\mathbf{G}$  est perpendiculaire aux plans de réflexion.

Le vecteur  $\mathbf{G}$  est un multiple du vecteur  $\mathbf{G}_0$  qui est le vecteur parallèle à  $\mathbf{G}$  joignant deux plans de Bragg voisins ( $\mathbf{G} = n\mathbf{G}_0$ ,  $n$  entier). En utilisant l'équation du paragraphe 3.2.3, nous avons  $G_0 = \frac{2\pi}{d}$ , où  $d$  est la distance entre deux plans réticulaires voisins. Par conséquent  $G = \frac{2\pi n}{d}$ . Par ailleurs, on peut déduire de la figure 3.8 que

$G = 2k \sin \theta$ , ce qui permet de retrouver la formule de Bragg :

$$k \sin \theta = \frac{2\pi}{\lambda} \sin \theta = \frac{\pi n}{d} \quad \Rightarrow \quad 2d \sin \theta = n\lambda \quad (3.9)$$

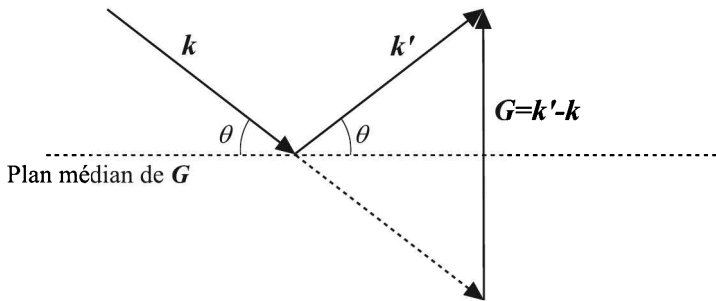


Figure 3.8 Relation entre la diffraction de Laue et celle de Bragg.

### 3.3.3 Zones de Brillouin

En divisant les deux membres de l'équation (3.8) par quatre, la condition de Laue s'écrit :

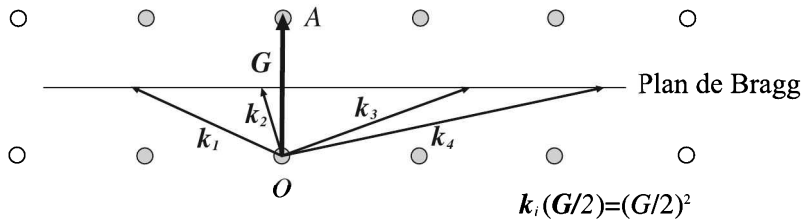
$$\mathbf{k} \left( \frac{1}{2} \mathbf{G} \right) = \left( \frac{1}{2} \mathbf{G} \right)^2 \quad (3.10)$$

On peut donner une interprétation géométrique simple à cette expression dans la figure 3.9. Soit  $O$  un point du réseau réciproque que nous prenons pour référence. Considérons un point  $A$  du réseau réciproque, voisin de  $O$  par commodité bien que cela ne soit pas nécessaire. Le plan médian à  $\mathbf{G} = \overrightarrow{OA}$  est symbolisé par la ligne de la figure qui représente une coupe à deux dimensions. Tout vecteur dont l'origine est au point  $O$  du réseau réciproque et dont l'extrémité appartient au plan médian satisfait à la condition de diffraction de Laue (3.10). C'est donc un vecteur d'onde possible pour l'onde diffractée. Ces plans médians des vecteurs du réseau réciproque sont les *plans de Bragg* dont nous avons parlé dans la section précédente.

La première *zone de Brillouin* est le plus petit volume de l'espace réciproque, contenant l'origine, qui est entièrement compris entre les plans médians des vecteurs du réseau réciproque partant de l'origine. Sa construction est analogue à celle de la maille de Wigner-Seitz (cf. figure 3.1) mais dans l'espace réciproque.

On peut généraliser cette définition et définir la  $n^{\text{ième}}$  zone de Brillouin comme le plus petit volume de l'espace réciproque compris entre la  $(n - 1)^{\text{ième}}$  zone de Brillouin et les plans médians des vecteurs du réseau réciproque tracés à partir de l'origine.





**Figure 3.9** Tout vecteur  $k$  dont l'origine est en  $O$  et dont l'extrémité se trouve dans le plan médian de  $G$  est un vecteur qui satisfait à la condition de Bragg puisque son produit scalaire avec  $\frac{1}{2}G$  vaut  $(\frac{1}{2}G)^2$ .

Les zones de Brillouin ont le même volume. Notons également que la  $n^{\text{ième}}$  zone de Brillouin est l'ensemble des points du réseau que l'on peut atteindre, à partir de l'origine, en traversant une seule fois  $n - 1$  plans médians de Bragg.

### 3.4 DÉFAUTS CRISTALLINS

Nous supposons dans la suite que les cristaux sont parfaits. Ceci n'est bien sûr qu'une approximation. En effet, tout cristal, naturel ou synthétique, contient des imperfections appelées *défauts cristallins*. Leur qualification est différente selon qu'ils sont de dimension zéro (*défauts ponctuels*), de dimension un (*dislocations*) ou de dimensions deux (*joints de grains*).

#### 3.4.1 Défauts ponctuels

Les défauts ponctuels peuvent avoir une petite extension spatiale et former des amas. Ils se classent en deux catégories : les défauts *extrinsèques* et les défauts *intrinsèques*.

Les défauts extrinsèques correspondent à des impuretés (atomes étrangers) placées dans le cristal soit en substitution d'un atome du réseau (c'est le cas pour le dopage des semi-conducteurs), soit en position interstitielle. Les défauts extrinsèques en position substitutionnelle sont souvent réalisés volontairement ; c'est le cas dans l'industrie des semi-conducteurs où ils permettent de modifier très notablement les propriétés électriques du matériau.

Les défauts intrinsèques résultent du fait que certains atomes du réseau n'occupent pas la position attendue. Ainsi des atomes peuvent être manquants en certains sites du réseau. Dans ce cas, le défaut est qualifié de *lacune*. Les atomes manquants sortent du cristal et restent sur sa surface. L'énergie nécessaire pour les créer est typiquement de l'ordre de 10 eV.

Un atome de la surface peut également migrer vers l'intérieur et se placer en position interstitielle. On parle alors de *défaut interstitiel*. Par chauffage, mais surtout

par bombardement nucléaire, on peut créer des lacunes. Par excitation thermique, la concentration des lacunes varie comme  $\exp(-E/k_B T)$ , où  $E$  est l'énergie nécessaire pour créer une lacune. Malgré la valeur élevée de  $E$ , il est relativement facile d'en créer une. En effet, sa création s'accompagne d'une augmentation de l'entropie  $S$  du cristal, car la structure est moins ordonnée. Ceci a comme conséquence de diminuer l'énergie libre ( $F = E - TS$ ).

Une lacune et un atome interstitiel proches l'un de l'autre constituent un *défaut de Frenkel*. Ce dernier peut être créé spontanément par excitation thermique ou par bombardement nucléaire lorsqu'un noyau incident déplace un atome du réseau. Dans ce dernier cas, l'atome du réseau recule, se place en position interstitielle, et il y a formation d'une lacune.

### 3.4.2 Dislocations

Les dislocations sont des défauts unidimensionnels qui sont importants dans le problème de la résistance des matériaux. Pour comprendre leur structure générale, on peut les créer par le processus imaginaire suivant. Supposons que l'on coupe le cristal selon une surface  $S$  quelconque dont une partie du bord est contenue dans le cristal. On déplace ensuite les deux parties du cristal situées de part et d'autre de la coupure d'un vecteur de translation du réseau. Selon la nature de la translation, il y a recouvrement d'une partie des cristaux ou création d'un vide entre les deux. Dans le premier cas on enlève les atomes en excès, dans le second on comble les nœuds vides par des atomes. On retrouve l'ordre cristallin parfait sauf au voisinage de la ligne de dislocation. Il existe deux classes particulières de dislocations qui méritent d'être mentionnées : les *dislocations-coins* et les *dislocations-vis*.

Une dislocation-coin peut être représentée comme l'insertion d'un demi-plan cristallin entre deux plans voisins. L'extrémité du demi-plan qui se trouve à l'intérieur du cristal constitue la ligne de dislocation. Les atomes des plans adjacents sont déplacés perpendiculairement à la ligne de dislocation. Nous pouvons utiliser comme métaphore celle d'un coin que l'on enfonce dans un morceau de bois.

Une dislocation-vis peut être représentée comme une coupure partielle du cristal selon un plan réticulaire suivie d'une translation (d'un nombre entier de la constante du réseau) effectuée en sens inverse pour les deux parties du cristal.

### 3.4.3 Joints de grains

On obtient un *joint de grains* à la jonction de deux cristaux ayant des orientations différentes. Ils sont très nombreux dans les matériaux polycristallins qui sont constitués d'un multitude de petits cristaux. Ils existent aussi dans les matériaux cristallins mais la différence d'orientation entre deux cristaux est faible ce qui conduit à les qualifier de *joints de grains de petit angle*. Ils modifient l'intensité des pics de Bragg observés

lors de la diffraction des rayons  $X$  sans pour autant les faire disparaître. La présence de joints de grains dans les cristaux peut contribuer à la précipitation d'impuretés ou à l'apparition d'autres défauts.

## EXERCICES

### Exercice 3.1

Le silicium a la structure cristalline du diamant (cf. section 3.2.5). Le côté du cube vaut  $a = 5,43 \text{ \AA}$ . Pour l' $AsGa$ , on a une structure analogue (cf. section 3.2.5).

1. Calculer le nombre d'atomes de silicium par unité de volume.
2. Calculer le nombre d'atomes d'arsenic et de gallium par unité de volume d'un cristal d' $AsGa$  pour lequel  $a = 5,65 \text{ \AA}$ .
3. Calculer le nombre d'atomes d' $As$  par unité de surface sur le plan (001) d'un cristal d' $AsGa$  se terminant sur un plan d'atomes de  $As$ .

### Exercice 3.2

1. Montrer que tout vecteur  $\mathbf{G}_{h_1 h_2 h_3} = h_1 \mathbf{A}_1 + h_2 \mathbf{A}_2 + h_3 \mathbf{A}_3$  du réseau réciproque est perpendiculaire au plan  $(h_1, h_2, h_3)$  du réseau direct.
2. Montrer que la distance séparant deux plans  $(h_1, h_2, h_3)$  du réseau direct,  $d_{h_1 h_2 h_3}$ , vaut 
$$d_{h_1 h_2 h_3} = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}_{h_1 h_2 h_3}|}.$$

### Exercice 3.3

Soit un système d'axes cartésiens dont les vecteurs de base selon les directions  $x$ ,  $y$  et  $z$  sont  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  et  $\mathbf{a}_3$ . Calculer les indices de Miller du plan qui coupe les axes en  $x = 2a_1$ ,  $y = 3a_2$  et  $z = 4a_3$ .

### Exercice 3.4

La densité de remplissage, ou compacité  $\zeta$ , est définie, dans une maille cristalline, comme le rapport entre le volume occupé par les particules et le volume de la maille.

1. Calculer la compacité d'un empilement cubique à faces centrées.
2. Même question pour un réseau cubique centré.

### Exercice 3.5

Calculer l'angle de Bragg d'un rayonnement  $X$  de  $15 \text{ nm}$  sur un cristal dont la maille est de  $2,53 \text{ \AA}$ .

## CORRIGÉS

### Exercice 3.1

1. Il y a 8 atomes au sommet de la maille qui appartiennent à 8 cubes ; ils comptent donc pour  $8/8=1$ . Il y a 4 atomes situés au milieu des faces qui appartiennent à 2 cubes ; ils comptent pour  $6/2=3$  atomes. La moitié des sites tétraédriques sont occupés, soit 4. Le cube de côté  $a$  contient donc au total  $1+3+4=8$  atomes de silicium. Le nombre d'atomes de silicium par unité de volume vaut

$$N = \frac{8}{a^3} = \frac{8}{(5,43 \times 10^{-10})^3} = 4,997 \times 10^{28} \text{ atome/m}^3$$

$$= 4,997 \times 10^{22} \text{ atome/cm}^3.$$

2. Pour l' $AsGa$ , supposons que les interstices tétraédriques soient occupés par le  $Ga$ . Dans ce cas, il y a 8 atomes aux sommets de la maille qui appartiennent à 8 cubes ; ils comptent donc pour  $8/8=1$ . Il y a 4 atomes situés au milieu des faces qui appartiennent à 2 cubes ; ils comptent pour  $6/2=3$  atomes. On a donc  $N_{As} = \frac{4}{a^3} = 2,22 \times 10^{22} \text{ atome/cm}^3$ . Il y a le même nombre d'atomes de  $Ga$  puisque 4 des sites tétraédriques sont occupés.

3. Sur une surface du cube correspondant au plan (001), on a 4 atomes d' $As$  appartenant à 4 carrés et un atome au centre de la face. Le nombre d'atomes d' $As$  est donc  $N_{As} = \frac{2}{a^2} = 6,265 \times 10^{14} \text{ atomes/cm}^2$ .

### Exercice 3.2

Si  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  et  $\mathbf{a}_3$  sont les vecteurs unitaires de l'espace direct, le plan  $(h_1, h_2, h_3)$  coupe les axes en  $\left(\frac{\mathbf{a}_1}{h_1}\right)$ ,  $\left(\frac{\mathbf{a}_2}{h_2}\right)$  et  $\left(\frac{\mathbf{a}_3}{h_3}\right)$ .

1. Le vecteur  $\frac{\mathbf{a}_1}{h_1} - \frac{\mathbf{a}_2}{h_2}$  appartient au plan du réseau direct et l'on a :

$$\mathbf{G}_{h_1 h_2 h_3} \cdot \left( \frac{\mathbf{a}_1}{h_1} - \frac{\mathbf{a}_2}{h_2} \right) = (h_1 \mathbf{A}_1 + h_2 \mathbf{A}_2 + h_3 \mathbf{A}_3) \cdot \left( \frac{\mathbf{a}_1}{h_1} - \frac{\mathbf{a}_2}{h_2} \right) = 0$$

compte tenu des relations 3.5. Par ailleurs, le vecteur  $\frac{\mathbf{a}_1}{h_1} - \frac{\mathbf{a}_3}{h_3}$ , qui est un autre vecteur du plan, est aussi perpendiculaire à  $\mathbf{G}_{h_1 h_2 h_3}$ . Par conséquent,  $\mathbf{G}_{h_1 h_2 h_3}$  est bien perpendiculaire au plan  $(h_1, h_2, h_3)$ .

2. Compte tenu du résultat précédent,  $\mathbf{n} = \frac{\mathbf{G}_{h_1h_2h_3}}{|\mathbf{G}_{h_1h_2h_3}|}$  est un vecteur unitaire perpendiculaire au plan  $(h_1, h_2, h_3)$ . La distance entre deux plans est :

$$d_{h_1h_2h_3} = \mathbf{n} \cdot \left( \frac{\mathbf{a}_1}{h_1} \right) = \frac{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{G}_{h_1h_2h_3}}{h_1 |\mathbf{G}_{h_1h_2h_3}|} = \frac{\mathbf{a}_1 \cdot (h_1 \mathbf{A}_1 + h_2 \mathbf{A}_2 + h_3 \mathbf{A}_3)}{h_1 |\mathbf{G}_{h_1h_2h_3}|} = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}_{h_1h_2h_3}|}$$

### Exercice 3.3

Les inverses des points d'intersection du plan avec les axes du repère sont :  $1/2$ ,  $1/3$  et  $1/4$ . Le plus petit multiple commun des entiers 2, 3 et 4 est 12. Les indices de Miller du plan sont donc 6, 4 et 3  $\Rightarrow (6, 4, 3)$ .

### Exercice 3.4

1. Pour le réseau cubique à faces centrées, il y a, dans un cube de côté  $a$ , 8 atomes aux sommets qui appartiennent à 8 cubes et 6 atomes au milieu de chacune des faces qui appartiennent à 2 cubes. Donc, au total, il y a  $\frac{8}{8} + \frac{6}{2} = 4$  atomes par cube. La distance entre les centres d'un atome du sommet et d'un atome situé au centre d'une face vaut  $\frac{a}{\sqrt{2}}$ . La compacité du réseau cfc est égale à :

$$\zeta = \frac{\frac{4}{3}\pi \left( \frac{a}{2\sqrt{2}} \right)^3 \times 4}{a^3} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} = 0,74$$

2. Dans le réseau cubique centré, il y a, dans un cube de côté  $a$ , 8 atomes aux sommets qui appartiennent à 8 cubes et un atome au centre. Il y a donc au total  $\frac{8}{8} + 1 = 2$  atomes par cube. La distance entre un atome du sommet et l'atome au centre du cube est égale à  $a \frac{\sqrt{3}}{2}$ , soit 2 fois le rayon d'un atome. La compacité du réseau est donc :

$$\zeta = \frac{\frac{4}{3}\pi \left( a \frac{\sqrt{3}}{4} \right)^3 \times 2}{a^3} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} = 0,68$$

### Exercice 3.5

La loi de Bragg est donnée par l'équation 3.9. Pour  $n = 1$ , on a  $\theta = \arcsin \left( \frac{1,5}{2 \times 2,53} \right)$  où  $\lambda$  et  $d$  sont exprimés dans la même unité, des Å. On trouve  $\theta = 17,2^\circ = 0,6$  radian.

## Chapitre 4

# Bandes d'énergie

Les propriétés électroniques des semiconducteurs sont gouvernées par celles des électrons qui baignent dans un potentiel périodique généré par les ions situés aux nœuds du réseau cristallin. Ce problème ne peut être résolu exactement et des approximations sont nécessaires. Dans tous les cas, les approches théoriques utilisées sont des approximations qui ne fournissent qu'une description, parmi d'autres, de la réalité. Un éclairage différent peut être obtenu selon l'approximation utilisée.

### 4.1 APPROXIMATIONS

S'il est simple d'écrire le hamiltonien d'un cristal parfait, il est par contre impossible de résoudre exactement l'équation de Schrödinger. Il faut donc faire des approximations. Nous allons introduire celles qui sont essentielles dans une approche théorique des semi-conducteurs.

Soient  $\mathbf{r}_i$  et  $\mathbf{p}_i$  la position et l'impulsion de l'électron  $i$  ;  $\mathbf{R}_j$  et  $\mathbf{P}_j$  celles du noyau  $j$ . La charge de l'électron est  $-e$ , sa masse  $m$ . La masse du noyau  $j$  est  $M_j$  (le cristal peut être composé d'atomes différents). Soit  $Z_j$  le numéro atomique du noyau  $j$  qui possède donc  $Z_j$  électrons. Le hamiltonien  $\hat{H}$  s'écrit :

$$\begin{aligned}\hat{H} = & \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_j \frac{\mathbf{P}_j^2}{2M_j} + \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j,j'}' \frac{Z_j Z_{j'} e^2}{|\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'}|} \\ & + \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,i'}' \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{Z_j e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j|}\end{aligned}\quad (4.1)$$

où  $\epsilon_0$  est la permittivité du vide. Dans cette expression, les sommes  $\sum_i$  et  $\sum_j$  doivent être faites sur tous les électrons et tous les noyaux. La somme  $\sum_{i,j}$  doit être effectuée sur toutes les paires électrons-noyaux. Les sommations de type  $\sum'_{i,i'}$  et  $\sum'_{j,j'}$  se font sur toutes les paires  $(i, i')$  et  $(j, j')$  à l'exception de celles où les indices sont identiques ( $i = i'$  et  $j = j'$  sont exclus). Les termes de l'expression (4.1) ont la signification physique suivante :

- les deux premiers termes représentent, respectivement, les énergies cinétiques des électrons et des noyaux ;
- les troisième et quatrième termes sont les énergies de répulsion coulombienne entre les noyaux et entre les électrons ;
- le dernier terme est l'énergie d'interaction entre les électrons et les noyaux.

Comme il y a de l'ordre de  $10^{23}$  atomes/cm<sup>3</sup>, et  $Z$  fois plus d'électrons (dans le cas où les atomes sont identiques), le nombre de variables est très grand pour un cristal macroscopique ( $\sim 10^{24} - 10^{25}$ ). L'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots) = E\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots) \quad (4.2)$$

permet d'obtenir la fonction d'onde stationnaire  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots)$ , qui dépend des positions de toutes les particules, et de calculer les niveaux d'énergie du cristal. La solution de (4.2) ne peut être qu'approchée. La plupart des modèles utilisés en physique des semi-conducteurs ont en commun trois approximations dont nous allons brièvement donner la teneur.

- La première consiste à séparer les électrons en deux groupes : les *électrons de valence* et ceux de *cœur*. Ces derniers appartiennent aux orbitales complètement remplies. Ils sont principalement localisés au voisinage du noyau dont ils dépendent. On les associe par conséquent au noyau et ils forment les *ions* qui sont aux nœuds du réseau cristallin. Les électrons de valence appartiennent aux orbitales atomiques de valence incomplètement remplies. Pour le silicium, il s'agit des orbitales  $3s$  et  $3p$ . Cette séparation en deux groupes permet de ne considérer, pour les électrons, que ceux de valence (nous continuerons, dans 4.1, à utiliser les indices muets  $i$  et  $i'$  mais leur domaine de variation sera réduit à celui des électrons de valence) et pour les noyaux, les ions (constitués des noyaux *et* de leurs électrons de cœur, indices  $j$  et  $j'$ ).

- La deuxième, appelée approximation de *Born-Oppenheimer* ou *approximation adiabatique*, est basée sur le fait que les noyaux sont beaucoup plus lourds que les électrons (le noyau de silicium, par exemple, a une masse  $\simeq 51\,400$  fois plus grande que celle de l'électron). Le mouvement des noyaux est par conséquent beaucoup plus lent que celui des électrons et ces derniers répondent pratiquement instantanément au mouvement des ions. Pour les électrons, les ions peuvent donc être considérés comme fixes. Les ions, qui ne peuvent pas suivre le mouvement des électrons, voient ces derniers comme un potentiel électronique moyen. L'approximation de Born-Oppenheimer

consiste à supposer que le hamiltonien du cristal est la somme de trois termes :

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{ions}}(\mathbf{R}_j) + \hat{H}_e(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_{j_0}) + \hat{H}_{e\text{-ions}}(\mathbf{r}_i, \delta\mathbf{R}_j) \quad (4.3)$$

où :

- $\hat{H}_{\text{ions}}(\mathbf{R}_j)$  est la partie du hamiltonien qui décrit le mouvement des ions sous l'influence de leur potentiel et du potentiel moyen des électrons,
- $\hat{H}_e(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_{j_0})$  est la partie du hamiltonien associée aux électrons dans laquelle on suppose que les ions sont gelés à leur position d'équilibre  $\mathbf{R}_{j_0}$ ,
- $\hat{H}_{e\text{-ions}}(\mathbf{r}_i, \delta\mathbf{R}_j)$  décrit le changement d'énergie des électrons lorsque les ions se déplacent d'une distance  $\delta\mathbf{R}_j = \mathbf{R} - \mathbf{R}_{j_0}$  par rapport à leur position d'équilibre  $\mathbf{R}_{j_0}$ . Ce terme, appelé *interaction électron-phonon*, est en particulier responsable de la résistance électrique des semi-conducteurs purs.

L'approximation de Born–Oppenheimer permet de séparer le mouvement des électrons (qui sont rapides) de ceux des ions (qui sont lents). Si l'on ne s'intéresse qu'aux propriétés des électrons, et non à leur interaction avec le réseau, il suffit alors de considérer le hamiltonien des électrons,  $\hat{H}_e$ , qui s'écrit maintenant sous la forme simplifiée suivante :

$$\hat{H}_e = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,i'} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{Z_j e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_{j_0}|} \quad (4.4)$$

En comparant cette expression avec (4.1), il faut noter que l'indice  $i$  se rapporte maintenant aux électrons de valence (les électrons de cœur ont été associés aux noyaux) et l'indice  $j$  aux ions (noyaux+ électrons de cœur).

• La troisième approximation utilisée est celle de *champ moyen* qui conduit au modèle de *particules indépendantes*. L'idée de base est de remplacer toutes les interactions à 2-corps (ce qui est le cas de l'interaction coulombienne qui agit entre deux particules chargées) par un potentiel (ou champ) moyen,  $V(\mathbf{r})$ , dans lequel baignent les particules. Le modèle est qualifié de *particules indépendantes* car l'interaction entre deux particules n'existe plus. On a substitué aux interactions à 2-corps un potentiel moyen généré par l'ensemble des particules. On suppose que le potentiel moyen est la seule interaction à laquelle soient soumises les particules, d'où l'expression d'interaction à 1-corps parfois utilisée dans la littérature. Le gros intérêt des approches de champ moyen est de ramener un problème à  $N$  corps, insoluble rigoureusement, à  $N$  problèmes à 1 corps que l'on peut, sinon résoudre exactement, du moins traiter de manière plus simple. Dans ce problème à 1 corps, la fonction d'onde cherchée  $\varphi$  ne dépend alors plus que d'une seule variable,  $\mathbf{r}$ , la position de l'électron, et l'équation de Schrödinger associée s'écrit :

$$\left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \varphi(\mathbf{r}) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}) \quad (4.5)$$



Il n'y a plus d'indice puisque l'on ne résout l'équation que pour un seul électron dans un potentiel moyen. La quantité  $\Delta$  est le laplacien à 3 dimensions. Pour résoudre l'équation de Schrödinger, il faut connaître le potentiel moyen  $V(\mathbf{r})$ . Ce dernier peut être calculé ou déterminé de manière empirique en ajustant des paramètres sur des données expérimentales.

La résolution de (4.5), connaissant  $V(\mathbf{r})$ , est complexe et nécessite d'autres approximations. Elle permet, en principe, de déterminer les niveaux d'énergie  $E_n$  dits à « une particule ». Comme on a  $N_e$  électrons indépendants, et que ceux-ci sont des fermions, on les place sur les niveaux d'énergie en commençant le remplissage par le bas et en tenant compte du principe de Pauli.

## 4.2 MÉTHODE DES LIAISONS FORTES

Les cristaux semiconducteurs utilisés dans l'industrie électronique sont d'une grande pureté<sup>1</sup>. Ils peuvent être considérés comme des cristaux quasi-parfaits de taille pratiquement infinie. Dans un cristal, les électrons sont soumis à un potentiel périodique qui conduit à une distribution des niveaux d'énergie différente de celle que l'on observe pour les atomes. Au lieu d'avoir, comme pour ces derniers, des niveaux d'énergie espacés les uns des autres, on observe des *bandes*, *i.e.* un grand nombre de niveaux confinés dans un intervalle d'énergie. Avant d'étudier un cristal unidimensionnel (chaîne linéaire d'atomes), nous commencerons par présenter une approche qualitative de cette question connue sous le nom de *méthode des liaisons fortes*. Elle a pour origine la méthode de *combinaison linéaire des orbitales atomiques* utilisée en chimie pour construire les liaisons covalentes. Les bandes d'énergie sont une généralisation de la notion d'orbitale moléculaire.

### 4.2.1 De l'atome à la molécule

Partons de l'atome d'hydrogène dont le niveau d'énergie le plus bas, qualifié de  $1s$ , vaut  $E_1 = -13,6 \text{ eV}^2$ . Il contient un électron lorsque l'hydrogène est dans son état

---

1. La fabrication de circuits intégrés nécessite des *plaquettes* (en anglais *wafers*) ou *tranches* de silicium monocristallin très pur qui ne doivent pas avoir de défaut de structure. Le nombre d'impuretés doit être très faible et leur distribution spatiale homogène. La pureté obtenue atteint 99,9999999999 %, ce qui est qualifié de « onze neufs ». Ces plaquettes, qui ont quelques dixièmes de mm d'épaisseur, ont des diamètres de plus en plus grands. Si un diamètre de  $8'' \approx 20 \text{ cm}$  (inches) est courant dans l'industrie, on commence maintenant à utiliser des wafers de  $12'' (\approx 30 \text{ cm})$ . La raison de l'augmentation du diamètre des tranches est la fabrication collective, *i.e.* simultanée, des circuits intégrés qui n'occupent qu'une petite surface sur celle-ci. Plus la surface est grande, plus le nombre de circuits intégrés sera élevé sur une plaquette et plus le coût sera bas. Les plaquettes sont découpées dans un très gros monocristal (de quelques kg à quelques dizaines de kilogrammes) dont l'élaboration nécessite une technologie complexe.

2.  $1s$ , car  $n = 1$ , et  $s$ , car le nombre quantique orbital  $\ell$ , lié au moment angulaire orbital de l'électron  $\ell\hbar$ , est nul. Selon la valeur de  $\ell$  ( $\ell = 0, 1, 2, \dots$ ) on note ( $s, p, d, \dots$ ).

fondamental. On note cette configuration par  $(1s)^1$  où l'exposant indique le nombre d'électrons présents dans l'orbitale atomique désignée entre parenthèses.

Si nous rapprochons deux atomes d'hydrogène de manière à former une molécule d'hydrogène<sup>3</sup>, nous observons que les orbitales atomiques ( $1s$ ) de chaque atome (il y en a donc 2 au total) se combinent pour donner 2 orbitales moléculaires. L'une a une énergie inférieure au niveau  $1s$  ; c'est l'*orbitale liante* notée  $\sigma_{1s}$ . L'autre est d'énergie supérieure : c'est l'*orbitale antiliante* notée  $\sigma_{1s}^*$ . Chacune d'entre-elles peut contenir deux électrons si l'on respecte le principe d'exclusion de Pauli. Puisque chacun des atomes fournit un électron, la configuration de la molécule d'hydrogène est  $(\sigma_{1s})^2$ . La liaison entre les deux atomes d'hydrogène est dite de type  $\sigma$  car elle possède une symétrie cylindrique autour de l'axe de symétrie de la molécule<sup>4</sup>. En mettant les deux électrons dans l'orbitale moléculaire  $\sigma_{1s}$ , nous avons utilisé tous les électrons disponibles et il n'y a aucun électron dans l'orbitale antiliante  $\sigma_{1s}^*$ .

Le mécanisme de séparation des niveaux que nous venons de décrire est très général. Partant de  $2N$  orbitales atomiques ( $N$  pour chaque atome), on crée, lorsque l'on forme une molécule diatomique,  $2N$  orbitales moléculaires dont certaines peuvent être dégénérées.  $N$  sont des orbitales liantes,  $N$  des orbitales antiliantes. Le nombre de liaisons est égal à la différence entre le nombre de paires d'électrons dans les orbitales liantes et antiliantes.

### 4.2.2 Fusion de deux boîtes cubiques

Considérons maintenant le modèle très simple dans lequel on suppose qu'un électron est confiné dans une boîte cubique de côté  $a$  (cf. section 1.11.3). L'énergie d'un électron dans la boîte cubique vaut  $3\epsilon_0$  dans l'état fondamental, *i.e.* dans l'état d'énergie le plus bas. Pour deux boîtes cubiques séparées, on a donc une énergie de  $6\epsilon_0$ . Formons à présent une seule boîte à partir de ces deux boîtes en mettant une de leur faces en commun (celle correspondant au plan  $xy$ , par exemple) et en retirant cette séparation. On obtient alors une boîte rectangulaire de côtés  $(a, a, 2a)$ . Les niveaux d'énergie sont donnés par

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{a^2} + \frac{n_z^2}{4a^2} \right) = \epsilon_0 \left( n_x^2 + n_y^2 + \frac{n_z^2}{4} \right),$$

où  $\epsilon_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ . L'énergie de l'état fondamental à une particule vaut maintenant  $(9/4)\epsilon_0 = 2,25\epsilon_0$ . On peut mettre deux électrons ayant les projections de leur spin opposées dans cet état. L'énergie du système est alors de  $4,5\epsilon_0$ . Par rapport au cas précédent, il y a une diminution de  $1,5\epsilon_0$  que l'on peut interpréter comme une « liaison »

3. Dans la molécule d'hydrogène, les deux protons sont séparés en moyenne de  $0,74 \text{ \AA}$  et l'énergie de liaison vaut  $4,5 \text{ eV}$ .

4. Pour plus de détails voir MQ, page 377 et suivantes.

entre les deux boîtes. L'analogie ne doit néanmoins pas être poussée trop loin. En effet, dans cet exemple, l'énergie de liaison est de nature cinétique alors que, dans les molécules, la formation de la liaison provient de l'énergie potentielle.

### 4.2.3 De l'atome au cristal

Que se passe-t-il maintenant si, à partir de  $N$  atomes, nous formons un cristal ? L'extension de ce que nous avons décrit dans la section 4.2.1 est naturelle. Partant d'une même orbitale atomique pour chacun des  $N$  atomes, nous allons créer  $N$  orbitales « cristallines » qui vont se répartir de part et d'autre de l'énergie de l'orbitale atomique de départ. Comme un grand nombre de niveaux se trouvent situés dans un intervalle d'énergie étroit, on qualifie cet ensemble de *bande d'énergie*. Pour fixer les idées, un cristal réel est un objet macroscopique qui contient de l'ordre de  $10^{23}$  atomes/cm<sup>3</sup> auxquels correspondent plus de  $10^{23}$  niveaux. Si l'on suppose une largeur de la bande d'énergie de l'ordre de 5 eV, l'écart entre deux niveaux d'énergie est d'environ  $5 \times 10^{-23}$  eV pour un cristal d'1 cm<sup>3</sup>. On a donc un continuum de niveaux d'énergie. En effet, il est impossible de séparer expérimentalement deux niveaux d'énergie ne serait-ce qu'à cause de la relation d'incertitude temps-énergie de Heisenberg.

### 4.2.4 Bande de valence, bande de conduction, gap

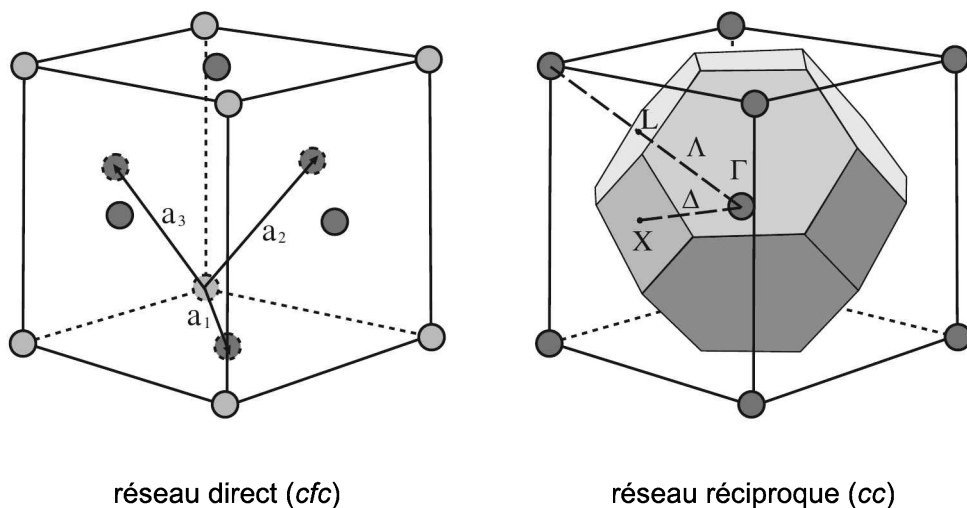
Comme pour les molécules pour lesquelles on peut avoir, *en énergie*, un recouvrement des couples constitués des orbitales moléculaires liantes et antiliantes, il peut aussi exister des recouvrements de bandes d'énergie dans les cristaux. Les propriétés chimiques des atomes ou des molécules sont liées aux propriétés des électrons de valence. Pour les cristaux, les propriétés électriques dépendent aussi des électrons les moins liés car les électrons situés dans les bandes les plus profondes sont trop liés aux noyaux pour pouvoir se déplacer dans le cristal.

Le remplissage des bandes d'énergie avec les électrons disponibles se fait sur le même principe que pour les molécules : par énergie croissante en respectant le principe d'exclusion de Pauli. La dernière bande d'énergie remplie, donc celle d'énergie la plus haute, est appelée, dans le domaine des semi-conducteurs, *bande de valence* car les électrons qu'elle contient jouent un rôle important dans les phénomènes électriques. Ceci est donc analogue aux électrons de valence des atomes ou des molécules qui conditionnent la réactivité chimique. La première bande inoccupée, par énergie croissante, est appelée la *bande de conduction*. Elle est située juste au-dessus de la bande de valence.

La différence d'énergie entre le haut de la bande de valence et le bas de la bande de conduction s'appelle le *gap*. C'est une quantité importante des matériaux semi-conducteurs pour lesquels le gap conditionne bon nombre de propriétés électroniques ou optiques.

## 4.3 SYMÉTRIES

Un cristal est invariant dans certaines translations mais beaucoup de cristaux possèdent des symétries supplémentaires et sont invariants dans certaines rotations et réflexions. Ces symétries simplifient le calcul des bandes d'énergie.



**Figure 4.1** Structure *cfc* à gauche (réseau direct) ; structure cubique centrée à droite (réseau réciproque). Quelques points et lignes de symétrie citées dans le texte sont indiqués et la première zone de Brillouin est le polyèdre en grisé.

Le traitement des symétries se fait habituellement dans le cadre de la *théorie des groupes*. Nous ne développerons pas celle-ci dans cet ouvrage élémentaire. Toutefois, nous allons introduire, pour le cas du silicium qui est le semi-conducteur le plus utilisé dans la réalisation des composants électroniques, quelques notations classiques. Celles-ci apparaissent souvent dans la littérature lors de la présentation de la structure de bandes en énergie des cristaux tridimensionnels.

La structure *cfc* (cubique faces centrée) est la structure de base d'un grand nombre de semi-conducteurs intéressants en électronique ou en opto-électronique. C'est en particulier le cas du silicium qui a la même structure cristalline que le diamant, ou de l'*AsGa*, qui a la structure cristalline du blende (*ZnS*). La maille élémentaire contient deux atomes (identiques dans le cas du *Si* ou différents dans le cas de l'*AsGa*). Les vecteurs primitifs du réseau direct ont pour coordonnées

$$\mathbf{a}_1 = \left(0, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right), \quad \mathbf{a}_2 = \left(\frac{a}{2}, 0, \frac{a}{2}\right) \quad \text{et} \quad \mathbf{a}_3 = \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, 0\right),$$

où  $a$  est la longueur du plus petit cube du réseau *cfc* (figure 4.1). Les vecteurs de base du réseau réciproque sont égaux à

$$\mathbf{A}_1 = \frac{2\pi}{a}(-1, 1, 1), \mathbf{A}_2 = \frac{2\pi}{a}(1, -1, 1) \quad \text{et} \quad \mathbf{A}_3 = \frac{2\pi}{a}(1, 1, -1).$$

Les points du réseau réciproque sont obtenus en partant d'un point particulier de cet espace et en lui appliquant des translations de multiples de  $\mathbf{A}_1$ ,  $\mathbf{A}_2$  et  $\mathbf{A}_3$ . Le réseau obtenu est un réseau *cubique centré* (*cc*) que l'on peut voir sur la partie droite de la figure (4.1). Tout vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  possible a pour origine et extrémité un point de ce réseau réciproque. La première zone de Brillouin est définie comme le plus petit polyèdre obtenu à partir des plans médians des vecteurs du réseau réciproque. Pour le cas qui nous intéresse ici, il s'agit d'un polyèdre constitué :

- de 6 carrés qui sont situés sur les 6 faces du cube (ils sont dans les plans bissecteurs des segments joignant le centre du cube aux centres des 6 cubes voisins ayant une face commune avec le cube considéré),
- et de 8 hexagones situés dans les plans bissecteurs des segments allant de l'atome situé au centre du cube à ses 8 voisins situés au sommet de celui-ci.

La symétrie de la zone de Brillouin dépend de la symétrie du cristal d'origine. Les points  $X$ ,  $\Gamma$  et  $L$  et les lignes  $\Lambda$  et  $\Delta$  jouent un rôle particulier par suite de la symétrie du cristal. Ils sont indiqués dans la partie droite de la figure (4.1). La convention généralement utilisée dans cette dénomination est de prendre des lettres *grecques* pour désigner les points et les lignes situées à l'intérieur de la zone de Brillouin, et des lettres *romanes* pour désigner les points et les lignes situées à la surface de celle-ci. Les 3 directions importantes du réseau réciproque d'un réseau *cfc* sont  $[100]$ ,  $[110]$  et  $[111]$ . Les points remarquables sont indiqués dans le tableau (4.1). La première zone de Brillouin associée au réseau *cfc* est très symétrique. Elle est invariante par rapport à certaines rotations (rotation de  $90^\circ$  par rapport aux trois axes de symétrie du cube qui passent au centre de deux faces opposées) et par réflexion par rapport à certains plans (plans passant par le centre du cube et perpendiculaires à deux faces opposées). Ces symétries ont pour conséquence de simplifier la structure des bandes d'énergie. Deux points particuliers sont à souligner :

- Si deux vecteurs d'onde  $\mathbf{k}$  et  $\mathbf{k}'$  peuvent être transformés l'un en l'autre par une opération de symétrie du réseau réciproque, les niveaux d'énergie électroniques sont égaux. Les points et les axes qui se transforment l'un en l'autre par les opérations de symétrie sont *équivalents*. La zone de Brillouin associée au réseau *cfc* possède ainsi 8 points équivalents  $L$  situés au centre des 8 hexagones. Ils ont la même énergie.
- Les fonctions d'onde des électrons possèdent également les propriétés de symétrie du cristal. Elles peuvent être construites en tenant compte de celles-ci et ainsi être classées en familles. Ceci permet de comprendre que certaines probabilités

de transition entre des états quantiques de symétries différentes s'annulent et d'en déduire des *règles de sélection* dans les processus d'excitation.

**Tableau 4.1** Points et lignes de haute symétrie dans les directions indiquées.

Direction	Point de départ	Ligne	Point d'arrivée
[100]	$\Gamma$	$\Delta$	$X$
[110]	$\Gamma$	$\Sigma$	$K$
[111]	$\Gamma$	$\Lambda$	$L$

## 4.4 APPROCHE DES LIAISONS FAIBLES

Si la *méthode des liaisons fortes* a la faveur des chimistes, le physicien préfère généralement approcher le problème en partant du gaz d'électrons libres auquel on applique un potentiel périodique perturbateur. C'est, par opposition à l'approche précédente, la *méthode des liaisons faibles*. Elle considère que les électrons sont quasi-libres, *i.e.* faiblement perturbés par le potentiel périodique.

### 4.4.1 Théorème de Bloch

Le théorème de Bloch permet de simplifier la recherche des solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps d'une particule de masse  $m$  dans un potentiel périodique  $V(\mathbf{r})$  :

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (4.6)$$

Lorsque le potentiel  $V(\mathbf{r})$  a la périodicité du réseau, il satisfait à l'équation d'invariance suivante :

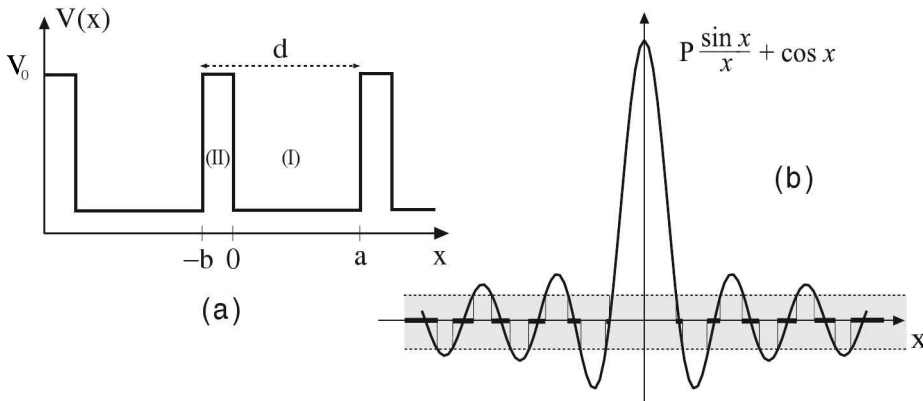
$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (4.7)$$

où  $\mathbf{R}$  est un vecteur quelconque du réseau de Bravais (réseau direct). Le théorème de Bloch stipule que la solution de (4.6), pour un potentiel satisfaisant à (4.7), est de la forme  $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , où la fonction  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  a la périodicité du réseau, *i.e.*  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ , pour tous les vecteurs  $\mathbf{R}$  du réseau de Bravais. L'indice  $n$  est un nombre quantique, appelé indice de bande, qui provient de ce qu'un niveau associé à  $\mathbf{k}$  est en général dégénéré. L'invariance pour les translations selon les vecteurs  $\mathbf{R}$  du réseau de Bravais peut aussi s'écrire sous la forme  $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r})$ . Cette équation exprime le fait que,  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$ , l'opérateur de translation d'une longueur  $\mathbf{R}$ , appliqué à la fonction  $\psi(\mathbf{r})$  donne la fonction au point  $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ . C'est une autre expression du théorème de Bloch.

#### 4.4.2 Modèle de Kronig–Penney

Le modèle de Kronig–Penney est une description schématique à une dimension d'un cristal. Malgré sa simplicité, il permet de comprendre l'existence de bandes d'énergie permises et interdites. On suppose que le potentiel créé par les ions aux nœuds du cristal a la forme indiquée sur la figure 4.2 (a). Le potentiel varie entre 0 et  $V_0$  avec une périodicité égale à  $d = a + b$ . La quantité  $a$  est la largeur où le potentiel est nul (région I) et  $b$  celle où  $V = V_0$  (région II). La région II symbolise, pour un cristal réel, la région proche des ions du réseau où le potentiel coulombien est répulsif alors que la région I représente grossièrement celle qui est située entre les ions. Sur la première période, le potentiel vaut donc :

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & \text{pour} & \quad 0 \leq x \leq a \\ V(x) &= V_0 & \text{pour} & \quad -b \leq x \leq 0 \end{aligned} \quad (4.8)$$



**Figure 4.2** (a) Potentiel à une dimension utilisé dans le modèle de Kronig–Penney. (b) Solution graphique de l'équation 4.13.

Ce motif est répété avec la période  $d$ . L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x) &= 0 & \text{pour la région (I)} \\ \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi(x) &= 0 & \text{pour la région (II)} \end{aligned} \quad (4.9)$$

Nous supposons que l'énergie de l'électron,  $E$ , est plus petite que  $V_0$ . Posons :

$$\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad \text{et} \quad \beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \quad (4.10)$$

Comme le potentiel est périodique, la fonction d'onde satisfait au théorème de Bloch. Par conséquent, elle est le produit d'une onde plane  $e^{ikx}$  par une fonction  $u_k(x)$  de

même périodicité que le potentiel périodique. Les calculs décrits dans MQ, section 4.8.3, conduisent à la condition suivante :

$$\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \text{sh}(\beta b) \sin(\alpha a) + \text{ch}(\beta b) \cos(\alpha a) = \cos k(a + b) \quad (4.11)$$

La modélisation du cristal nous amène à supposer que  $b \ll a$  et que  $V_0 \gg E$ . On suppose aussi que le produit  $V_0 b$ , qui est relié à l'efficacité de la barrière, *reste fini*. Ceci signifie que lorsque  $V_0$  croît,  $b$  décroît. Comme  $V_0 \gg E$ , l'équation (4.11) se simplifie, si l'on pose  $P = maV_0b/\hbar^2$ , en :

$$P \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} + \cos(\alpha a) = \cos(ka) \quad (4.12)$$

La quantité  $\cos(ka)$  est toujours comprise entre  $-1$  et  $+1$  ( $-1 \leq \cos(ka) \leq +1$ ). Par contre, le premier membre de l'équation (4.12) peut être supérieur à 1. Dans ce cas, il n'y a pas de solution à cette équation, donc pas de niveaux d'énergie possibles. Typiquement, l'équation à résoudre est du type :

$$P \frac{\sin x}{x} + \cos x = \cos(ka) \quad (4.13)$$

La solution graphique de l'équation (4.13) est schématiquement indiquée sur la figure 4.2 (b). Les solutions acceptables sont dans la partie grisée ( $-1 \leq \cos(ka) \leq +1$ ). Seules les parties de la courbe  $P \frac{\sin x}{x} + \cos x$  situées dans cette partie grisée ont une solution. Les valeurs de  $x$  obtenues sont indiquées en gras sur l'axe des  $x$ . On constate que toutes les valeurs de  $x$ , *i.e.* de l'énergie dans le cas qui nous intéresse, ne sont pas permises. Toutefois, contrairement à l'atome d'hydrogène, il ne s'agit pas de niveaux discrets mais d'intervalles finis et continus en énergie : ce sont les *bandes permises*. Entre celles-ci se trouvent des *bandes interdites*.

Dans ce modèle, la taille des bandes permises et interdites dépend de la valeur du paramètre  $P$ . Considérons quelques cas limites.

- Lorsque  $P$ , *i.e.*  $V_0 b$ , augmente, la courbe  $P \frac{\sin x}{x} + \cos x$  est plus piquée et les bandes permises deviennent plus étroites.
- Lorsque  $P$ , *i.e.*  $V_0 b$ , diminue, la courbe  $P \frac{\sin x}{x} + \cos x$  est moins piquée et les bandes permises deviennent plus larges.
- Si  $P \rightarrow 0$ , on a, à la limite  $P = 0$ . Dans ce cas  $\cos \alpha a = \cos ka$  et il faut prendre la solution  $\alpha = k$ . L'énergie devient alors  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ , c'est à dire celle d'un électron libre.
- L'autre extrême correspond à  $P \rightarrow \infty$ . Comme le second membre de l'équation (4.12) reste fini, on doit avoir  $\frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} = 0$ . Ceci n'est possible que si  $\alpha a = n\pi$ , ce qui conduit à  $\alpha^2 = \frac{n^2 \pi^2}{a^2}$  pour  $n = 1, 2, 3 \dots$ . Les niveaux d'énergie sont donnés



par :  $E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$ . On reconnaît les niveaux d'énergie d'une particule entre deux murs séparés par la distance  $a$ . En fait l'électron est confiné entre deux barrières infinies. La figure (4.3) schématise cette transition.

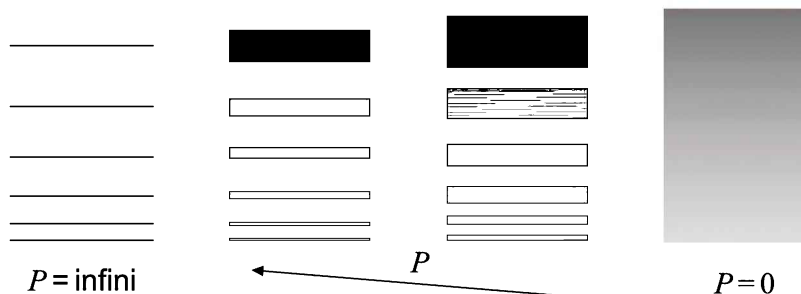


Figure 4.3 Évolution de la structure des niveaux d'énergie en fonction de  $P$ .

#### 4.4.3 Le problème à 3 dimensions

Le problème est beaucoup plus complexe à trois dimensions. Deux méthodes d'approximation sont fréquemment rencontrées : la méthode du pseudo-potentiel et la méthode dite  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ .

##### a) Méthode du pseudo-potentiel

La configuration électronique de l'atome de silicium est  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ . Les électrons du silicium peuvent être groupés en deux catégories : les électrons de cœur, appartenant aux orbitales atomiques  $1s, 2s, 2p$ , et les électrons de valence, appartenant aux orbitales  $3s, 3p$ . En d'autres termes, les couches  $n = 1$  et  $n = 2$ , qui sont complètes, contiennent les électrons de cœur et la couche  $n = 3$ , incomplète, contient les électrons de valence. Comme pour le carbone, la configuration  $3s^2 3p^2$  ( $2s^2 2p^2$  pour le carbone) se réorganise pour permettre de créer quatre liaisons covalentes formant un tétraèdre régulier. Cela se fait par *hybridation* (cf. MQ, section 9.8.) de deux des orbitales  $s$  avec les deux orbitales  $p$ . On obtient ainsi quatre orbitales hybrides  $sp^3$  équivalentes.

Cette séparation entre électrons de valence et électrons de cœur permet de considérer que les électrons de valence sont quasi libres et que les électrons de cœur sont, au contraire, fortement liés au noyau, formant ainsi un ion chargé positivement  $Si^{4+}$ . La méthode du pseudopotentiel consiste à remplacer le potentiel d'interaction réel (défini dans le cadre des approximations présentées dans la section 4.1) par un potentiel permettant de décrire convenablement l'interaction des électrons de valence avec les ions  $Si^{4+}$ . La fonction d'onde obtenue en résolvant une équation de Schrödinger de la forme 4.5, avec comme potentiel le pseudopotentiel, conduit à une fonction d'onde qui

permet de bien décrire les propriétés des semi-conducteurs qui ne dépendent que des électrons de valence. C'est une bonne approximation de la vraie fonction d'onde loin du cœur des ions mais elle ne reproduit pas bien celle-ci au voisinage de ce dernier. Il y a deux voies pour appliquer la méthode du pseudopotentiel :

- La première utilise des données expérimentales (gaps en énergie, par exemple) pour ajuster un certain nombre de paramètres nécessaires à la résolution du problème. On qualifie cette méthode d'*empirique*.
- La seconde résout directement le problème à partir des principes fondamentaux, sans apport de données expérimentales. Ce sont les méthodes dites *ab initio* ou *autocoherentes*.

#### b) Méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

L'idée de la méthode  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  est de partir de l'équation de Schrödinger pour la fonction d'onde à 1-corps et d'utiliser le théorème de Bloch dans la première zone de Brillouin, *i.e.* de prendre la fonction d'onde sous la forme  $\Phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ . Il apparaît alors dans l'équation de Schrödinger un terme  $\frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{m}$  que l'on traite comme une perturbation. Cette façon de traiter le problème est appelée la méthode  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ .

## 4.5 PROPRIÉTÉS STATIQUES DES ÉLECTRONS

L'expérience nous montre que les propriétés de volume d'un cristal, comme sa capacité calorifique par exemple, ne dépendent pas de l'état précis de sa surface. Ceci provient de ce que, pour un objet macroscopique, le nombre d'atomes en surface est bien inférieur au nombre d'atomes situés dans le volume.

Cette indépendance permet une certaine liberté dans le choix des conditions aux limites en surface. Celui qui est fait habituellement, pour des raisons de commodité mathématique, est celui de *Born-von Kármán*. Il consiste à introduire une périodicité macroscopique dans le cristal ce qui revient à reproduire celui-ci à l'infini. Ceci conduit à des conditions aux limites périodiques que l'on peut interpréter d'une manière qu'il est facile de visualiser pour une chaîne linéaire. En effet, cette condition aux limites revient à fermer la chaîne et donc à supposer que l'on soude ses deux extrémités.

Pour comprendre un peu mieux la condition aux limites périodique de Born-von Kármán, imaginons un cube contenant une particule dont le comportement est classique. Cette particule se déplace en ligne droite et, au bout d'un certain temps, atteint l'une des faces du cube. Plusieurs conditions aux limites sont possibles. L'une est de supposer que la particule se réfléchit sur la paroi et donc revient en arrière. La condition aux limites périodique de Born-von Kármán suppose, au contraire, que la particule sort du cube mais y rentre immédiatement par la face opposée avec le même vecteur vitesse.

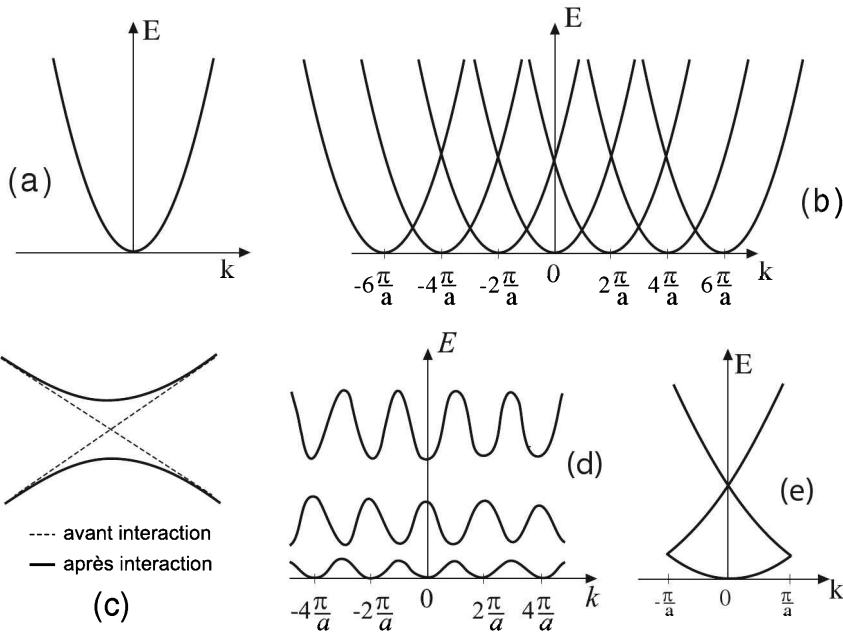
## 4.6 SCHÉMA RÉDUIT DE BRILLOUIN

Restreignons d'abord notre étude à celle d'un gaz d'électrons à une dimension. Si les électrons sont libres, ou placés dans un potentiel constant, la relation de dispersion est

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \implies k = \sqrt{2mE/\hbar^2} = \alpha.$$

Si l'on trace  $E$  en fonction de  $k$ , on obtient une parabole (figure 4.4, (a)).

Considérons maintenant un gaz d'électrons dans un potentiel périodique  $V(x)$ . Nous avons traité ce problème dans la section 4.4.2 : c'est le modèle de Kronig-Penney. La limite du gaz d'électrons libre est obtenue lorsque l'intensité de la barrière disparaît, *i.e.* lorsque le paramètre  $P$  tend vers zéro. À la limite, on a  $\cos \alpha a = \cos ka \implies \alpha a = ka + n2\pi$ ,  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . On obtient ainsi  $k + n\frac{2\pi}{a} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \sqrt{E}$ . Ainsi, pour un potentiel périodique infiniment faible, la relation de dispersion est une série de paraboles répétées avec une période égale à  $\frac{2\pi}{a}$  (figure 4.4 (b)).



**Figure 4.4** Illustration très schématique à une dimension : (a) relation de dispersion d'un gaz d'électrons libres, (b) relation de dispersion obtenue à la limite  $P \rightarrow 0$  du modèle de Kronig-Penney, (c) séparation des niveaux d'énergie lors d'un croisement, (d) relation de dispersion dans un modèle d'électrons quasi libres, (e) schéma réduit de Brillouin.

Dans le modèle de Kronig-Penney, nous avons des discontinuités pour les valeurs de  $k = n\frac{\pi}{a}$ ,  $n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ . Celles-ci existent même lorsque  $P$  est très faible.

Ce modèle est alors désigné sous le nom de *modèle des électrons quasi libres*. Si l'on part du faisceau de paraboles indiqué dans la figure 4.4 (b), qui est aussi valable pour une faible interaction, la mécanique quantique ne permet pas à deux états quantiques de même symétrie de se croiser. Lorsque la situation peut se produire, comme c'est le cas lorsque les paraboles se coupent, il y a séparation des niveaux selon le schéma indiqué dans la figure 4.4 (c). Les niveaux initiaux, indiqués en pointillés, s'éloignent au voisinage du point de croisement comme il est indiqué sur la figure. Cette séparation provient des interactions résiduelles qui, bien que très faibles, sont toujours présentes. Ceci conduit à une modification de la topologie de la relation de dispersion qui est schématisée dans la figure 4.4 (d). On voit ainsi apparaître des bandes interdites.

Pour un cristal à une dimension, la première zone de Brillouin est comprise entre  $-\frac{\pi}{a}$  et  $+\frac{\pi}{a}$ . La seconde contient les intervalles  $[-2\frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{a}]$  et  $[\frac{\pi}{a}, 2\frac{\pi}{a}]$ , la troisième comprend  $[-3\frac{\pi}{a}, -2\frac{\pi}{a}]$  et  $[2\frac{\pi}{a}, 3\frac{\pi}{a}]$  et ainsi de suite. Toutes les zones de Brillouin ont la même longueur, égale à  $2\pi/a$ . Plutôt que de laisser prendre à  $k$  toutes les valeurs possibles, on introduit le schéma de la *zone réduite de Brillouin* dans lequel on restreint les valeurs de  $k$  à la première zone de Brillouin. Pour faire cela, il faut ramener toutes les branches de la relation de dispersion dans la première zone. Ceci conduit, pour un gaz d'électrons libres à une dimension, au schéma indiqué dans la figure 4.4 (e).

De manière plus générale, il est coutume d'introduire 3 schémas différents lors de la discussion des zones de Brillouin :

- le premier est le schéma de Brillouin classique, ou schéma développé, dans lequel on ne retient, dans chaque zone de Brillouin que la partie des bandes correspondantes. Ainsi la partie de la bande  $i$  dans la zone  $i$ . Pour un gaz d'électrons libres, cela conduit à la figure 4.4 (a) qui serait alors le raccordement de plusieurs parties de paraboles ;
- le schéma réduit de Brillouin, dans lequel toutes les bandes sont tracées dans la première zone de Brillouin. Pour un gaz d'électrons libres cela correspond à la figure 4.4 (e) ;
- le schéma des zones périodiques, dans lequel toutes les bandes sont tracées dans toutes les zones. Cela conduit, pour un gaz d'électrons libres à la figure 4.4 (b) ou, dans le modèle d'électrons quasi libres, à la figure 4.4 (d).

On peut généraliser cette discussion à trois dimensions. La relation de dispersion des électrons libres est alors un paraboléoïde de révolution. La limite du modèle à liaisons faibles conduit à des paraboléoïdes se déduisant les uns des autres par translation d'un vecteur du réseau réciproque. Chaque paraboléoïde appartient à plusieurs zones de Brillouin. Le schéma réduit de Brillouin consiste à ramener tous les morceaux de ces paraboléoïdes dans la première zone de Brillouin par des translations appropriées.

Un des intérêts du schéma réduit de Brillouin vient de ce que  $\mathbf{k}$  est conservé lors de l'excitation d'un électron d'un état vers un autre, qui est induite par un opérateur invariant dans les translations du réseau. Ceci n'est pas le cas si l'on considère l'ensemble des zones de Brillouin et  $\mathbf{k}$  n'est conservé qu'à un vecteur  $\mathbf{G}$  du réseau réciproque près.

## 4.7 L'ÉQUATION CENTRALE

On peut écrire l'équation de Schrödinger associée à un électron dans un potentiel périodique  $V(\mathbf{r})$  sous une autre forme connue sous le nom d'*équation centrale*. En effet, le potentiel périodique  $V(\mathbf{r})$  satisfait à :

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$$

où  $\mathbf{R}$  est un vecteur quelconque du réseau direct. Cette périodicité nous conduit tout naturellement à développer le potentiel périodique en série de Fourier :

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} U_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})$$

où les  $\mathbf{G}$  sont les vecteurs du réseau réciproque. De même, il est naturel de chercher la fonction d'onde à une particule,  $\varphi(\mathbf{r})$  sous la forme d'un développement en ondes planes  $\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$  :

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} C_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$$

Nous allons supposer que le cristal, repéré par les vecteurs primitifs  $\mathbf{a}_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ), a pour dimension  $L_i = N_i a_i$  dans la direction  $i$ . Le nombre de mailles primitives vaut  $N = N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$ . Pour que  $\varphi(\mathbf{r})$  satisfasse aux conditions aux limites périodiques de Born–von Kármán, il faut que chaque composante du développement ci-dessus y satisfasse aussi. Par conséquent :

$$q_i = \frac{2\pi n_i}{N_i a_i} \quad \text{où } n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, i = 1, 2, 3$$

Notons que la périodicité évoquée ci-dessus ne correspond pas à la périodicité du réseau mais à celle associée aux limites du cristal. En utilisant les deux développements dans l'équation de Schrödinger, on obtient :

$$\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{q}} q^2 C_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{G}} U_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \sum_{\mathbf{q}} C_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} = E \sum_{\mathbf{q}} C_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$$

soit :

$$\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{q}} q^2 C_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{q}} e^{i(\mathbf{q} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}} = E \sum_{\mathbf{q}} C_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$$

Compte tenu de la condition aux limites de Born–von Kármán, on peut remplacer, dans la double somme de l'équation ci-dessus, la somme sur  $\mathbf{q}$  par une somme sur  $\mathbf{q} - \mathbf{G}$  ce qui revient à faire le changement ( $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{q} - \mathbf{G}$ ) :

$$\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{q}} q^2 C_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{q}-\mathbf{G}} U_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} = E \sum_{\mathbf{q}} C_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$$

Pour que cette équation soit satisfaite, il faut que les coefficients du développement de l'onde plane soient égaux deux à deux<sup>5</sup> :

$$\frac{\hbar^2 q^2}{2m} C_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{G}} U_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{q}-\mathbf{G}} = E C_{\mathbf{q}} \text{ pour chaque coefficient } C_{\mathbf{q}}$$

Cette forme de l'équation de Schrödinger est appelée *équation centrale*. Son intérêt, dans le domaine de la physique des solides, provient de la décroissance rapide des coefficients  $U_{\mathbf{G}}$  ce qui permet de ne considérer, dans la pratique, qu'un nombre restreint de vecteurs  $\mathbf{G}$  du réseau réciproque au lieu d'une infinité.

## 4.8 SURFACE DE FERMİ

Les électrons sont des fermions ; ils obéissent au principe de Pauli et les propriétés électroniques des solides sont essentiellement déterminées par celles des électrons proches du niveau de Fermi. Pour un gaz d'électrons libres, constitué de  $N$  électrons dans un volume  $V$ , l'énergie de Fermi (définie comme étant le potentiel chimique à  $T = 0$  K), est donnée par

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3}.$$

À  $T = 0$  K, les électrons sont, dans l'espace des  $k$ , tous contenus dans une sphère de rayon  $E_F$  appelée sphère de Fermi. Les électrons de plus haute énergie sont ceux dont l'énergie vaut  $E = E_F$ , i.e. ceux situés sur la surface de la sphère de Fermi. La présence d'un potentiel périodique a pour effet de modifier la relation de dispersion des électrons. Il s'ensuit que les surfaces d'énergie constante, et en particulier la surface de Fermi, ne sont plus sphériques mais prennent des formes très compliquées. La détermination de la surface de Fermi, dont la connaissance est importante, est d'une grande complexité.

5. Ceci revient à multiplier les deux membres de l'équation par  $e^{i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{r}}$  et à intégrer sur tout l'espace. L'orthogonalité des ondes planes, qui forment une base, conduit à introduire la distribution de Dirac  $\delta(\mathbf{q}' - \mathbf{q})$ , et on obtient l'équation ci-dessous après intégration.

Regardons par exemple les métaux pour lesquels la modulation du potentiel périodique est relativement faible. Procédons de façon analogue à ce que nous avons fait pour construire la structure de bande des réseaux vides lorsque nous avons regroupé les différentes composantes de la relation de dispersion dans la première zone de Brillouin. Comme la modulation du potentiel est faible, nous pouvons supposer que la relation de dispersion des électrons de valence est proche de celle des électrons libres (sauf au voisinage des plans de Bragg). Dans ce cas, la surface de Fermi est une sphère dont le rayon est donné par l'expression

$$k_F = \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3}.$$

Pour certains métaux monovalents, comme le sodium, cette sphère de Fermi est entièrement contenue dans la première zone de Brillouin. Mais, dans le cas général, elle est à cheval sur plusieurs zones. Dans ce cas, la surface de Fermi est découpée en plusieurs parties appartenant chacune à une zone de Brillouin particulière. On peut alors procéder de la même manière que pour la construction du spectre de bandes du réseau vide en faisant, pour chaque zone, des translations de manière à les ramener dans la première zone de Brillouin. Dans ce cas on obtient une surface de Fermi, coupée par les plans de Bragg de la première zone, à laquelle sont rajoutés des morceaux provenant des zones de Brillouin supérieures. Ceci conduit à des structures géométriques très complexes. Au voisinage d'un plan de Bragg, la relation de dispersion est modifiée même dans le cas d'une faible modulation du potentiel périodique. Comme la vitesse de groupe d'un électron occupant un état sur le plan de Bragg n'a pas de composante perpendiculaire à ce plan, il s'ensuit que le gradient de  $E(k)$  est dans le plan de Bragg. Par conséquent, les surfaces de Fermi coupent les plans de Bragg perpendiculairement.

## 4.9 MÉTAUX, ISOLANTS, SEMI-CONDUCTEURS

Nous allons maintenant essayer de comprendre pourquoi il y a des conducteurs, des isolants et des semi-conducteurs dans la nature.

### 4.9.1 Discontinuités dans le spectre en énergie

Le potentiel périodique présent dans un cristal conduit à des discontinuités dans le spectre en énergie des électrons  $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k})$ . Celles-ci sont à l'origine de l'existence de bandes interdites qu'on ne peut expliquer dans le cadre d'un modèle à électrons libres. Leur existence permet de comprendre pourquoi il y a des métaux, des semi-conducteurs et des isolants dans la nature. La discontinuité de la relation de dispersion sur un plan de Bragg a comme ordre de grandeur l'intensité du potentiel perturbateur  $V$ .

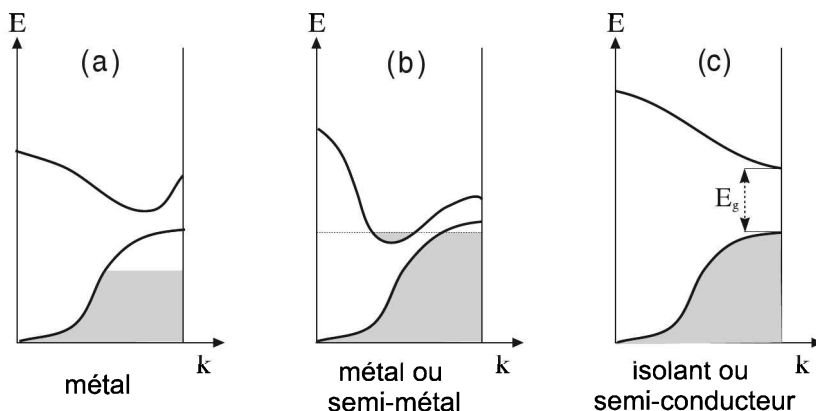
Pour un cristal à une dimension, il y a création d'une bande interdite dès que l'on tient compte d'un potentiel périodique. Ceci est particulier au modèle à une dimension.

Pour des dimensions supérieures, le problème est un peu plus compliqué mais on peut donner quelques indications qualitatives sur le type de frontière géométrique qui existe entre les différentes zones de Brillouin.

- Dans un cristal à une dimension, la zone  $n$  a des points communs avec les zones  $n + 1$  et  $n - 1$ .
- Dans un cristal bidimensionnel, la zone  $n$  a des côtés communs avec les zones  $n \pm 1$  et des points communs avec les zones  $n \pm 2$ .
- Pour un cristal tridimensionnel, la zone  $n$  a des faces communes avec les zones  $n + 1$  et  $n - 1$ , des côtés communs avec les zones  $n + 2$  et  $n - 2$ , et des points communs avec les zones  $n + 3$  et  $n - 3$ . Par conséquent, dans le cas tridimensionnel, un potentiel périodique de faible intensité peut ne pas être suffisant pour créer une bande interdite.

Compte tenu de ces remarques, il est possible d'envisager trois situations différentes, schématiquement présentées dans la figure 4.5, pour le spectre en énergie des cristaux :

- La bande de plus haute énergie contenant des électrons est partiellement remplie, même à température nulle  $T = 0$  K. C'est le cas, par exemple, des métaux alcalins.
- Les deux bandes les plus hautes contenant des électrons se chevauchent complètement ou partiellement.
- La bande de valence et la bande de conduction sont séparées et la bande de valence est complètement remplie à  $T = 0$  K. La différence d'énergie entre le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction est le gap  $E_g$ . Ce schéma s'applique aux semi-conducteurs et aux isolants qui ne diffèrent que par la valeur du gap.



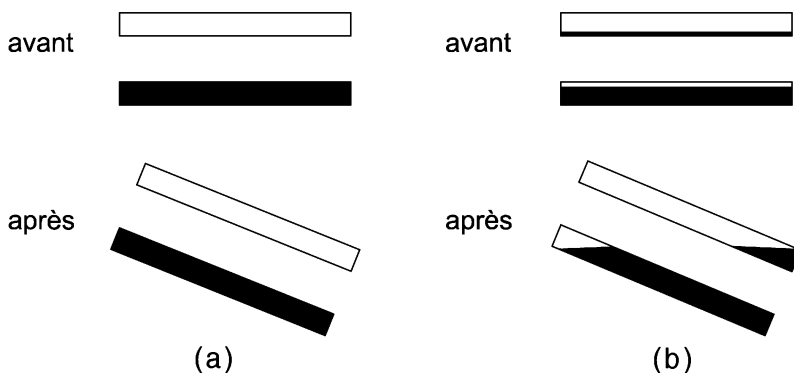
**Figure 4.5** Schéma illustrant les trois situations décrites dans le texte.



### 4.9.2 Analogie hydraulique

Le phénomène de conduction électrique est de nature essentiellement quantique bien que certaines descriptions classiques permettent parfois d'en décrire certains aspects. En effet, classiquement, on s'attendrait à ce que tous les électrons de la bande d'énergie la plus haute participent au phénomène de conduction électrique lorsque l'on applique un champ électrique, *i.e.* une différence de potentiel, à un cristal. On sait qu'il n'en n'est rien sinon tous les cristaux seraient conducteurs. Ceci provient de ce que les électrons d'une bande complètement remplie ne peuvent pas contribuer à la circulation d'un courant électrique. La raison profonde vient de la nature quantique de ces particules qui sont des fermions. En effet, pour qu'un courant électrique soit généré lorsque l'on applique un champ électrique externe, il faut que les électrons puissent changer d'état quantique. Ceci n'est pas possible au sein même de la bande à laquelle ils appartiennent si celle-ci est complètement remplie (principe de Pauli).

Une analogie hydraulique permet de comprendre le phénomène de conduction électrique. Considérons pour cela deux tubes cylindriques fermés à leurs extrémités (figure 4.6). L'un complètement rempli d'eau, est l'analogue de la dernière bande remplie ; l'eau jouant le rôle du gaz d'électrons. L'autre tube est rempli d'air (il n'y a pas d'eau) ; il joue le rôle de la première bande vide. L'eau va jouer ici le rôle des électrons.



**Figure 4.6** Analogie hydraulique illustrant le processus de conduction dans le cas où la bande de valence est pleine (a) ou partiellement remplie (b).

Appliquer un champ électrique à un cristal revient à imposer une différence de potentiel entre ses deux extrémités, donc à changer l'énergie potentielle de l'une d'entre-elles. Dans l'analogie hydraulique, ceci revient à déplacer, par exemple, la partie gauche des tubes vers le haut.

Lorsque le tube inférieur est complètement rempli et l'autre vide (figure 4.6 (a)), il ne se passe rien. Par contre, s'il y a de l'air dans le tube inférieur et de l'eau dans celui situé au-dessus (figure 4.6 (b)), nous observons un déplacement de l'eau dans les deux

tubes lorsque nous changeons l'énergie potentielle de l'une de ses extrémités. L'air va vers la gauche alors que l'eau va vers la droite. Dans la première situation, nous n'observons aucun déplacement contrairement à ce qui se passe dans la seconde.

Nous avons un comportement analogue pour les électrons d'un semi-conducteur. Lorsque la bande de valence est pleine et la bande de conduction vide, il n'y a aucun mouvement global des électrons, donc aucune conduction. Celle-ci n'apparaît que lorsque la bande de valence et la bande de conduction sont partiellement remplies.

## 4.10 DE L'ISOLANT AU MÉTAL

Le comportement électrique d'un cristal, dont la bande de valence est complètement remplie et la bande de conduction vide à  $T = 0$ , dépend de la valeur du gap  $E_g$ . En effet, il faut pouvoir faire passer des électrons de la bande de valence à la bande de conduction. Le mécanisme qui permet cette excitation peut être l'agitation thermique, *i.e.* la température du cristal. Rappelons à ce propos que l'énergie moyenne d'une particule libre en équilibre thermique à la température  $T$  est de  $\frac{1}{2}k_B T$  par degré de liberté (*cf.* section 2.6), or  $k_B T = 0,025 \text{ eV} = 1/40 \text{ eV}$  à  $25^\circ\text{C}$  pour un gaz d'électrons libres. Si la valeur du gap est grande, comme c'est le cas pour le diamant ( $E_g = 5,5 \text{ eV}$ ), la proportion d'électrons passant de la bande de valence à la bande de conduction est négligeable et le cristal se comporte comme un isolant.

Si  $E_g \simeq 1 - 2 \text{ eV}$ , comme pour le silicium pour lequel  $E_g = 1,12 \text{ eV}$ , des électrons peuvent passer de la bande de valence à la bande de conduction. Le cristal conduit l'électricité et sa conductance augmente avec la température puisque de plus en plus d'électrons seront excités de la bande de valence vers la bande de conduction : on a un cristal *semi-conducteur*.

Lorsque la bande supérieure est incomplètement remplie, ou chevauche la bande située juste au-dessus, il suffit de très peu d'énergie pour exciter les électrons, soit dans leur propre bande (dans le premier cas), soit dans la bande suivante (dans le second). Par conséquent, la conduction électrique est facile et le cristal se comporte comme un métal.

### 4.10.1 Métaux

Les métaux alcalins (*Li, Na, K, Rb, Cs*) et certains métaux de transition (*Cu*) ou nobles (*Ag, Au*) sont monovalents ; ils ont un seul électron de valence par atome. Cela signifie que la dernière bande est à moitié pleine (figure 4.5 (a)). Un champ électrique peut alors déplacer des électrons et ceci explique la grande conductivité électrique de ces éléments.

Il est par contre difficile de comprendre, avec un schéma dans lequel la dernière bande occupée est séparée de la première bande vide, pourquoi les alcalino-terreux (*Be, Mg, Ca, Sr et Ba*), qui sont bivalents (chaque atome a deux électrons de valence),

sont aussi de bons conducteurs électriques. En effet, un raisonnement simpliste conduirait au schéma de la figure 4.5 (c) et les électrons de la dernière bande occupée ne pourraient pas contribuer au processus de conduction électrique. La nature métallique des alcalino-terreux provient du chevauchement des bandes (ceci est schématiquement illustré dans la figure 4.5 (b)). La bande inférieure n'est pas complètement remplie alors que la bande supérieure l'est partiellement. Si ce chevauchement est très faible (bande de valence presque complètement remplie associée à une bande de conduction presque complètement vide) la conduction peut être plus faible que pour les métaux habituels. On parle alors de semi-métal.

La grande conductivité des métaux provient de ce qu'un grand nombre d'électrons peuvent participer au processus de conduction électrique. Il est donc difficile de moduler leur conductivité de façon simple<sup>6</sup>. En conséquence, l'usage des métaux dans les composants électroniques est principalement limité à des rôles de composants passifs (interconnexions, contacts, *etc.*).

#### 4.10.2 Isolants

Voyons maintenant l'autre extrême en terme de conductivité électrique : les isolants. Ils correspondent au schéma de la figure 4.5 (c) avec une bande interdite dont la largeur est bien supérieure à l'énergie d'agitation thermique  $k_B T = 0,025$  eV. C'est le cas du diamant dont le gap vaut 5,5 eV. Comme la bande permise la plus haute est complètement remplie, il n'est pas possible d'accélérer des électrons avec un champ électrique extérieur car il n'y a pas d'état d'excitation libre de faible énergie.

#### 4.10.3 Semi-conducteurs

Un semi-conducteur est intermédiaire entre un métal et un isolant. À  $T = 0$  K, il se comporte comme un isolant mais il conduit l'électricité dès que la température augmente. Sa conductivité augmente avec la température contrairement aux métaux.

La structure de bande est analogue à celle des isolants (figure 4.5 (c)) avec une zone interdite séparant la bande de valence de celle de conduction, mais la largeur de celle-ci est plus faible. Elle est par exemple de 1,17 eV pour le silicium et de 1,52 eV pour l'AsGa.

À  $T = 0$  K, la bande permise occupée la plus haute est complètement remplie : c'est la *bande de valence*. La bande permise vide la plus basse est la *bande de conduction* ; elle est vide à  $T = 0$  K. Lorsque la température augmente, l'énergie d'agitation thermique excite un certain nombre d'électrons de la bande de valence vers la bande de conduction. Comme celle-ci est incomplètement remplie, il y a conduction si l'on

---

6. À basse température, la superconductivité d'un métal peut apparaître, éliminant ainsi les phénomènes de dissipation d'énergie par résistance électrique.

applique un champ électrique. À cette conduction d'origine électronique, s'ajoute celle des trous qui sont les places vacantes laissées par les électrons dans la bande de valence. Pour un semi-conducteur, la conductivité est d'autant plus grande que le nombre d'électrons dans la bande de conduction est élevé, *i.e.* que la température est plus grande.

Il est possible de faire varier la conductivité des semi-conducteurs sur plusieurs ordres de grandeur ce qui rend ces derniers très intéressants pour réaliser des composants électroniques actifs.

## EXERCICES

### Exercice 4.1

Considérons un électron dans un cristal parfait.

1. Sa fonction d'onde est-elle périodique ?
2. Sa probabilité de présence est-elle périodique ?

### Exercice 4.2

On considère un cristal parfait et l'opérateur  $\hat{T}_{\mathbf{R}}$  défini comme  $\hat{T}_{\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ , où  $\psi(\mathbf{r})$  est une fonction quelconque et  $\mathbf{R}$  le vecteur de translation. On désignera par  $c(\mathbf{R})$  les valeurs propres de  $\hat{T}_{\mathbf{R}}$ . Soit  $\hat{H}$  le hamiltonien du cristal ( $\hat{H}(\mathbf{r}) = \hat{H}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ ).

1. Montrer que  $[\hat{H}, \hat{T}_{\mathbf{R}}] = 0$ . Que peut-on en conclure sur les vecteurs propres ?
2. Montrer que  $\hat{T}_{\mathbf{R}}\hat{T}_{\mathbf{R}'} = \hat{T}_{\mathbf{R}'}\hat{T}_{\mathbf{R}} = \hat{T}_{\mathbf{R}+\mathbf{R}'}$ . Quelles relations satisfont la valeur propre  $c(\mathbf{R} + \mathbf{R}')$  en fonction de  $c(\mathbf{R})$  et  $c(\mathbf{R}')$  ?
3. Si les  $\mathbf{a}_i$  sont les vecteurs primitifs du réseau, on peut écrire  $c(\mathbf{a}_i) = \exp(i2\pi h_i)$ , où  $h_i$  est un nombre approprié. Si  $\mathbf{R}$  est un vecteur joignant deux points du réseau cristallin ( $\mathbf{R} = u_1\mathbf{a}_1 + u_2\mathbf{a}_2 + u_3\mathbf{a}_3$ ), exprimer  $c(\mathbf{R})$  en fonction de  $c(\mathbf{a}_i)$ .
4. Vérifier que le résultat précédent pour  $c(\mathbf{R})$  est équivalent à  $c(\mathbf{R}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R})$ , où  $\mathbf{k} = h_1\mathbf{A}_1 + h_2\mathbf{A}_2 + h_3\mathbf{A}_3$ . Les  $\mathbf{A}_i$  sont les vecteurs primitifs du réseau réciproque. Montrer que l'on retrouve le théorème de Bloch exprimé sous la forme du suivante :

$$\hat{T}_{\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R})\psi(\mathbf{r}).$$

### Exercice 4.3

Les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène sont :

$$\varepsilon_n = -\frac{1}{n^2} \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{me^4}{2\hbar^2}$$

(cf. MQ, section 9.1.2), où  $m$  est la masse de l'électron,  $-e$  sa charge élémentaire,  $\epsilon_0$  la constante diélectrique du vide et  $n$  le nombre quantique principal.

1. Calculer, en J et eV, l'énergie du niveau fondamental.

2. Pour un semi-conducteur, l'énergie d'un de ses électrons les moins liés peut être évaluée comme celle d'un atome d'hydrogène dans lequel l'électron aurait une masse effective  $m^*$ , différente de celle de l'électron, et dans lequel la constante diélectrique du milieu serait celle du semi-conducteur. Donner, dans ces conditions, l'expression de l'énergie du niveau fondamental et en calculer la valeur pour de l'AsGa pour lequel la constante diélectrique relative vaut  $\epsilon_r = 13,2$  et  $m^* = 0,067m$ .

## CORRIGÉS

### Exercice 4.1

La fonction d'onde de l'électron dans le cristal est donnée par le théorème de Bloch :  $\psi_k(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_k(\mathbf{r})$  où  $u_k(\mathbf{r})$  a la périodicité du cristal ( $u_k(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = u_k(\mathbf{r})$ ).

1.  $\psi_k(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}+\mathbf{T})}u_k(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{T}}\psi_k(\mathbf{r})$ . La fonction d'onde n'a pas la périodicité du cristal.

2. La probabilité de présence,  $\mathcal{P} = \psi_k^*(\mathbf{r})\psi_k(\mathbf{r}) = u_k^*(\mathbf{r})u_k(\mathbf{r})$  est par contre périodique.

### Exercice 4.2

1.  $\hat{T}_{\mathbf{R}}\hat{H}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = \hat{H}(\mathbf{r} + \mathbf{R})\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \hat{H}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \hat{H}(\mathbf{r})\hat{T}_{\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r})$ . Donc, quel que soit  $\psi(\mathbf{r})$ ,  $[\hat{T}_{\mathbf{R}}\hat{H}]\psi(\mathbf{r}) = 0$ , soit  $[\hat{T}_{\mathbf{R}}\hat{H}] = 0$ . On peut construire un ensemble commun de vecteurs propres à  $\hat{T}_{\mathbf{R}}$  et  $\hat{H}$  :  $\hat{H}\varphi = E\varphi$  et  $\hat{T}_{\mathbf{R}}\varphi = c(\mathbf{R})\varphi$ .

2.  $\hat{T}_{\mathbf{R}}\hat{T}_{\mathbf{R}'}\psi(\mathbf{r}) = \hat{T}_{\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}') = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}' + \mathbf{R})$ .  $\hat{T}_{\mathbf{R}'}\hat{T}_{\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}) = \hat{T}_{\mathbf{R}'}\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R} + \mathbf{R}')$ .  $\hat{T}_{\mathbf{R}+\mathbf{R}'}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R} + \mathbf{R}')$ . Donc  $\hat{T}_{\mathbf{R}}\hat{T}_{\mathbf{R}'} = \hat{T}_{\mathbf{R}'}\hat{T}_{\mathbf{R}} = \hat{T}_{\mathbf{R}+\mathbf{R}'}$ . On en déduit que  $c(\mathbf{R} + \mathbf{R}') = c(\mathbf{R})c(\mathbf{R}')$ .

3. En utilisant le résultat précédent, on a :  $c(\mathbf{R}) = c(\mathbf{a}_1)^{u_1}c(\mathbf{a}_2)^{u_2}c(\mathbf{a}_3)^{u_3}$ .

4.  $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R})$  est équivalent à  $c(\mathbf{a}_1)^{u_1}c(\mathbf{a}_2)^{u_2}c(\mathbf{a}_3)^{u_3}$  si l'on tient compte des relations 3.5. On retrouve par conséquent une expression du théorème de Bloch.

### Exercice 4.3

1. On trouve  $\epsilon_1 = -2,17 \times 10^{-18}\text{J}$  soit  $-13,6\text{eV}$ .

2.  $E_1 = \frac{m^*}{m} \left( \frac{1}{\epsilon_r} \right)^2 \epsilon_1 = -5,2\text{meV}$ .

## Chapitre 5

---

# Dynamique du réseau

Les atomes du réseau cristallin vibrent. Ces vibrations sont quantifiées et le quantum d'énergie associé est le *phonon*. Elles jouent un rôle important dans les propriétés thermodynamiques du cristal et interviennent aussi dans les excitations électroniques mettant en jeu des photons.

### 5.1 VIBRATIONS DU RÉSEAU

Nous allons limiter notre étude à celle d'un réseau unidimensionnel d'atomes de maille  $a$  car cela suffit pour comprendre une bonne partie de la physique ayant trait à la dynamique du réseau. À température nulle ( $T = 0$  K), les atomes sont pratiquement au repos (à l'énergie de point zéro près, d'origine quantique) et sont situés aux nœuds du réseau. Lorsque la température  $T$  augmente, les atomes vibrent autour de leur position d'équilibre. On peut traiter ce mouvement en utilisant l'approximation harmonique, *i.e.* en considérant que l'énergie potentielle  $V$  est un oscillateur harmonique (ressort parfait) de constante  $\beta$  ( $V(u) = \beta u^2$ , où  $u = x - x_0$  est l'écart du ressort par rapport à sa position d'équilibre  $x_0$ ). Ceci revient à dire que la force  $F = -\frac{dV(u)}{du} = -\beta u$  est linéaire en  $u$ . L'approximation harmonique n'est donc rien d'autre qu'un développement de Taylor limité au premier ordre en  $u$ . Notons que l'on ne considère que l'influence des plus proches voisins d'un atome donné.

#### 5.1.1 Réseau monoatomique unidimensionnel

Soit un réseau unidimensionnel monoatomique de maille  $a$  et soit  $M$  la masse des atomes. Nous désignerons par  $u_n$  le déplacement de l'atome  $n$  par rapport à sa position d'équilibre ( $u_n$  peut être positif ou négatif). Le déplacement relatif entre les atomes

$n$  et  $n + 1$  vaut  $(u_n - u_{n+1})$ . Celui entre  $n$  et  $n - 1$  vaut  $(u_n - u_{n-1})$ . La force  $F_n$  qui s'exerce sur l'atome  $n$  vaut :

$$F_n = -\beta [(u_n - u_{n+1}) + (u_n - u_{n-1})] = \beta (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) \quad (5.1)$$

L'équation de Newton appliquée à l'atome  $n$  donne :

$$F_n = M \frac{d^2 u_n}{dt^2} \quad (5.2)$$

Les équations (5.1) et (5.2) conduisent à l'équation différentielle suivante :

$$M \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \beta (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) \quad (5.3)$$

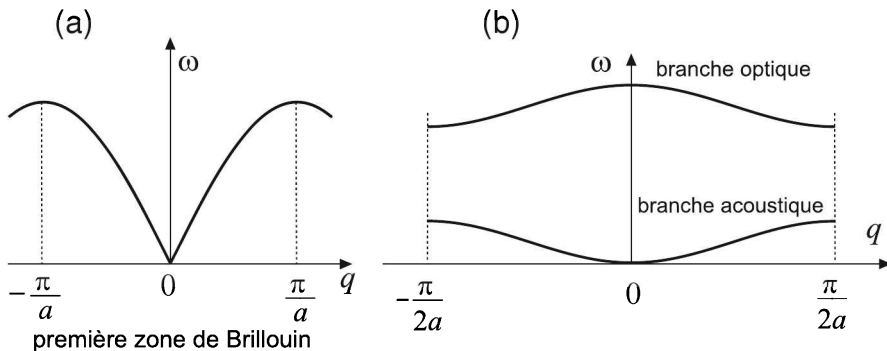
Cherchons la solution de (5.3) comme une onde progressive de la forme :

$$u_n = A \exp [i (qna - \omega t)] \quad (5.4)$$

où  $q$  et  $\omega$  sont respectivement le vecteur d'onde et la pulsation de cette onde progressive. La quantité  $na$  est la coordonnée de l'atome  $n$  dans sa position d'équilibre. En substituant (5.4) dans (5.3) on obtient la relation de dispersion suivante :

$$\omega = \sqrt{\frac{4\beta}{M}} \left| \sin \left( \frac{qa}{2} \right) \right| \quad (5.5)$$

Elle est non linéaire et schématiquement illustrée par la figure 5.1 (a). La fréquence  $\omega$  trouvée est la même pour tous les atomes du réseau et correspond à ce que l'on appelle un *mode normal*. La vibration des atomes se traduit par la propagation d'une onde progressive de pulsation  $\omega$ . Lorsque le vecteur d'onde est à l'un des bords de la zone de Brillouin ( $q = \pm\pi/a$ ), la fréquence du mode normal est maximum et vaut  $\omega_{\max} = \sqrt{4\beta/M}$ .



**Figure 5.1** (a) Relation de dispersion pour un cristal monoatomique unidimensionnel. (b) Relation de dispersion pour un cristal diatomique unidimensionnel.

Supposons que la chaîne unidimensionnelle de longueur  $L$  soit constituée de  $N + 1$  atomes disposés aux nœuds d'un réseau de maille  $a$  (il y a  $N$  mailles élémentaires). Le nombre de modes, *i.e.* le nombre de micro-états accessibles au système, est égal au nombre de degrés de liberté, *i.e.*  $N$ . Ce résultat peut être obtenu soit en fixant les atomes situés aux deux extrémités de la chaîne, soit en supposant une condition aux limites périodique (*cf.* section 4.5).

### 5.1.2 Réseau diatomique unidimensionnel

Nous allons maintenant considérer un réseau diatomique formé d'atomes de masses respectives  $M_1$  et  $M_2$  ( $M_1 > M_2$ ). Nous placerons les atomes de masse  $M_1$  aux positions impaires ( $2n + 1$ ) et les atomes de masse  $M_2$  aux positions paires ( $2n$ ). Nous supposerons, pour simplifier, que la constante de force est la même pour les deux types d'atomes et égale à  $\beta$ . Un raisonnement analogue à celui de la section précédente conduit aux équations suivantes :

$$\begin{aligned} M_1 \frac{d^2 u_{2n+1}}{dt^2} &= \beta (u_{2n+2} + u_{2n} - 2u_{2n+1}) \\ M_2 \frac{d^2 u_{2n}}{dt^2} &= \beta (u_{2n+1} + u_{2n-1} - 2u_{2n}) \end{aligned} \quad (5.6)$$

On cherche les solutions sous la forme :

$$\begin{aligned} u_{2n+1} &= A \exp [i [q(2n + 1)a - \omega t]] \\ u_{2n} &= B \exp [i (q2na - \omega t)] \end{aligned} \quad (5.7)$$

où  $A$  et  $B$  sont deux constantes. En substituant (5.7) dans (5.6) on obtient un système linéaire de 2 équations à 2 inconnues ( $A$  et  $B$ ) sans second membre :

$$\begin{aligned} A(2\beta - M_1\omega^2) - 2B\beta \cos qa &= 0 \\ -2A\beta \cos qa + B(2\beta - M_2\omega^2) &= 0 \end{aligned} \quad (5.8)$$

Ce système n'a de solution non triviale que si le déterminant associé est nul :

$$\begin{vmatrix} 2\beta - M_1\omega^2 & -2\beta \cos qa \\ -2\beta \cos qa & 2\beta - M_2\omega^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (5.9)$$

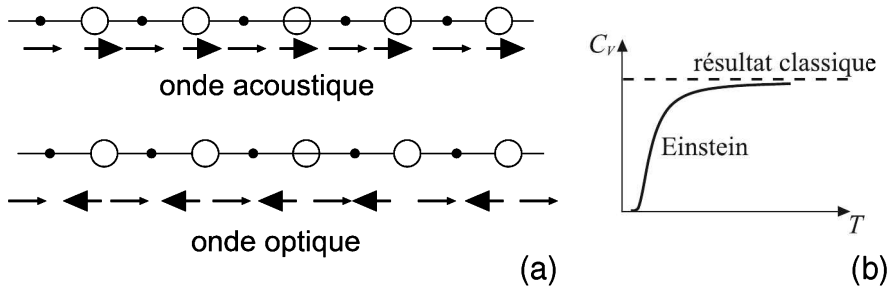
Soit  $\frac{1}{M_{\text{red}}} = \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}$  la masse réduite des deux atomes, on obtient :

$$\omega^2 = \beta \frac{1}{M_{\text{red}}} \pm \beta \sqrt{\frac{1}{M_{\text{red}}^2} - 4 \frac{\sin^2 qa}{M_1 M_2}} \quad (5.10)$$

Cette équation admet 2 solutions. Il y a donc deux relations de dispersion qui sont schématiquement illustrées, en fonction de  $q$ , dans la figure 5.1 (b). La relation de



dispersion correspondant au signe moins est associée aux fréquences les plus basses : elle est appelée *branche acoustique*. Celle qui correspond au signe plus est associée aux hautes fréquences : on l'appelle *branche optique*<sup>1</sup>. Sur la zone de Brillouin, correspondant à  $q = \pm\pi/2a$ , on a  $\omega = \sqrt{\frac{2\beta}{M_1}}$  pour la branche acoustique et  $\omega = \sqrt{\frac{2\beta}{M_2}}$  pour la branche optique. Dans le mode acoustique, les atomes voisins vibrent en phase alors que dans le mode optique, ils vibrent en opposition de phase. Ceci est schématiquement illustré dans la figure 5.2 (a).



**Figure 5.2** (a) Vibration en phase (onde acoustique) ou hors de phase (onde optique) dans un réseau unidimensionnel. (b) Dans l'approche d'Einstein, la chaleur spécifique molaire suit une sigmoïde alors qu'elle est constante dans une approche classique.

### 5.1.3 Le cristal réel

Un cristal réel est un édifice cristallin à trois dimensions. Les concepts que nous avons mis en évidence sont toujours valables moyennant quelques modifications mineures que nous allons maintenant présenter.

Le modèle à une dimension peut ainsi représenter de manière convenable les oscillations se propageant selon les directions  $[100]$ ,  $[110]$  ou  $[111]$  du cristal constitué d'un seul type d'atome. En effet, pour de tels déplacements, les plans réticulaires se déplacent en phase. Ce déplacement peut se faire *parallèlement* ou *perpendiculairement* au vecteur d'onde. Dans le premier cas on parle d'*onde longitudinale* ; dans le second d'*onde transverse*. De même qu'il y a trois vecteurs unitaires orthogonaux, il y a 3 modes orthogonaux de vibrations : 1 longitudinal et 2 transverses. Dans un cristal formé de  $N$  mailles élémentaires contenant chacune un seul atome, il y a  $3N$  degrés de liberté puisque chaque atome a 3 degrés de liberté. Le nombre de modes normaux de vibration possibles est égal au nombre de degrés de liberté, soit  $3N$ .

1. Une branche acoustique décrit des vibrations dont la fréquence varie linéairement en  $q$  dans la limite des grandes longueurs d'onde. Au contraire, une branche optique décrit des vibrations dont la fréquence ne s'annule pas pour les grandes longueurs d'onde.

Pour un cristal formé de  $N$  mailles élémentaires contenant chacune 2 atomes différents, comme c'est le cas du cristal de silicium, on a  $6N$  degrés de liberté. Il y a donc au total  $6N$  modes de vibration possibles. On peut les grouper en  $3N$  modes qui constituent les *branches acoustiques* (1 longitudinale et 2 transversales) et  $3N$  autres qui constituent les *branches optiques* (1 longitudinale et 2 transversales).

## 5.2 PHONONS

L'énergie de vibration des atomes est quantifiée. Dans le cadre de l'approximation harmonique, les niveaux d'énergie de vibration sont ceux d'un oscillateur harmonique (cf section 1.11.2). Néanmoins, il y a quantification même dans le cas d'une oscillation anharmonique. Le quantum d'énergie de vibration est appelé *phonon*. Lors d'une interaction, l'énergie ne peut donc être échangée que sous forme de *phonons*. L'onde associée au phonon est une onde élastique dont l'équation (5.4) constitue un exemple, mais un phonon peut aussi avoir un comportement corpusculaire. Il y a donc une analogie de concept avec le photon. Ainsi, l'énergie  $E$  d'un phonon est reliée à sa pulsation  $\omega$  par  $E = \hbar \omega$ .

Dans les sections précédentes, nous avons parlé de branches, une branche étant caractérisée par un indice  $s$ , i.e. un nombre quantique. Un mode normal est caractérisé par une fréquence  $\omega_s(\mathbf{q})$ . Dans un langage classique, on parle de nombre de modes normaux intervenant dans une excitation,  $n_{qs}$ . Quantiquement, on parle plutôt de *phonons* et l'on dit qu'un état est caractérisé par la présence de  $n_{qs}$  phonons. Dans l'approximation harmonique l'énergie totale de vibration est la somme des énergies de tous les phonons possibles  $(\mathbf{q}, s)$  :

$$E = \sum_{\mathbf{q}s} \left( n_{\mathbf{q}s} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_s(\mathbf{q}) \quad (5.11)$$

La quantité  $\hbar \mathbf{q}$  est associée au phonon bien que ce soit la quantité de mouvement du cristal pour  $\omega_s(\mathbf{q})$ . En fait, la quantité de mouvement réelle d'un phonon est nulle. Ceci vient de ce qu'une onde de vibration du réseau résulte de la combinaison de déplacements relatifs d'atomes du réseau qui se compensent mutuellement. La quantité de mouvement d'un phonon, calculée à partir des déplacements des atomes, ne fait intervenir que les coordonnées relatives d'atomes pris deux à deux. Par conséquent, la quantité de mouvement totale est nulle. Le cas  $\mathbf{q} = 0$  est particulier car il correspond à un mouvement de translation uniforme du cristal. Dans ce cas, il n'y a pas déformation du cristal et aucune quantité de mouvement ne se propage à l'intérieur de celui-ci bien que le cristal ait une quantité de mouvement d'ensemble non nulle.

Bien que la quantité de mouvement du phonon soit nulle, on associe souvent au phonon la *quantité de mouvement du cristal*, ou *moment cristallin*,  $\hbar \mathbf{q}$ . La raison de

cette pratique provient de ce qu'elle permet d'utiliser la conservation de l'impulsion<sup>2</sup> lors d'une interaction mettant en jeu des phonons.

Lors de la diffraction d'un faisceau de rayons  $X$  sur un cristal, nous avons la relation  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}$  ou  $\hbar \mathbf{k}' - \hbar \mathbf{G} = \hbar \mathbf{k}$ . Il s'agit d'un processus de diffusion élastique d'un photon sur le cristal. Cette condition exprime le fait que le cristal recule avec une quantité de mouvement  $-\hbar \mathbf{G}$ . Il s'agit d'un recul d'ensemble du cristal mais, celui-ci étant infini, il a une masse infinie et reste fixe lors de l'interaction.

Si la diffusion d'un photon est inélastique, avec création d'un phonon de vecteur d'onde  $\mathbf{q}$ , la règle de sélection s'écrit  $\mathbf{k}' + \mathbf{q} = \mathbf{k} + \mathbf{G}$  et tout se passe comme si le phonon avait une impulsion  $\hbar \mathbf{q}$ .

Pour un mécanisme dans lequel un phonon est absorbé, la règle de sélection s'écrit  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{G}$  ou  $\mathbf{k}' - \mathbf{q} = \mathbf{k} + \mathbf{G}$ .

## 5.3 PROPRIÉTÉS THERMIQUES

### 5.3.1 Chaleur spécifique du réseau cristallin

Les bons conducteurs électriques sont aussi, en général, de bons conducteurs de la chaleur mais il existe des exceptions. Le diamant en est une puisque c'est un isolant électrique mais un excellent conducteur de la chaleur<sup>3</sup>. On observe, pour les éléments usuels, que la conductivité thermique varie sur environ 4 ordres de grandeur ; ceci est à comparer à la conductivité électrique qui varie sur près de 25 ordres de grandeur.

Les électrons sont responsables de la conductivité thermique et de la conductibilité électrique des métaux. Par contre, la conductivité thermique des mauvais conducteurs est dominée par les propriétés du cristal. Nous n'allons considérer ici que la contribution provenant du réseau cristallin.

La chaleur spécifique est la dérivée par rapport à la température de l'énergie interne. Celle-ci peut être calculée soit à volume constant et l'on obtient la chaleur spécifique à volume constant  $C_V$ , soit à pression constante et l'on obtient la chaleur spécifique à pression constante  $C_P$ . Expérimentalement, on mesure  $C_P$  mais on calcule habituellement  $C_V$ . En fait, pour les solides, la différence entre ces deux quantités est très faible

2. Il y a conservation de la quantité de mouvement pour le système total mais ceci ne se traduit pas toujours par une expression simple lorsque l'on considère un sous-système du système total, ce que l'on fait souvent pour des raisons de simplification ou d'intérêt.

3. Pour certains diamants monocristallins très purs, la conductivité thermique est de  $24\text{--}25 \text{ Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$  alors que celle du cuivre, pourtant réputé bon conducteur de la chaleur, n'est que de  $4 \text{ Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$  et celle du silicium de  $1,5 \text{ Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$ . Certains diamants synthétiques, préparés dans des conditions particulières atteignent même des valeurs de conductivité thermique égale à  $33 \text{ Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$ . Cette forte conductivité thermique explique pourquoi le toucher par la langue d'un diamant permet de voir si c'est un diamant ou du verre. En effet, le diamant donne l'impression de froid.

(de l'ordre du pour cent pour le cuivre à la température ordinaire). Pour un gaz parfait monoatomique, cette différence est bien plus grande puisque  $(C_P - C_V)/C_V = 2/3$ . La chaleur spécifique, ou capacité calorifique, d'un solide est liée à sa structure atomique.

À la température ordinaire, la capacité calorifique à volume constant,  $C_V$ , de la plupart des solides monoatomiques est approximativement de 25 J/mol.K. C'est la loi de Dulong et Petit(1819). Toutes les capacités calorifiques sont nulles pour  $T = 0$  K. Elles augmentent ensuite comme  $T^3$  pour finalement saturer. Ceci se produit aux environs d'une température  $\theta_D$  connue sous le nom de température de Debye ( $\theta_D = 650$  K pour le silicium).

Il n'est pas possible de reproduire, à basse température, l'évolution de la chaleur spécifique en fonction de la température dans le cadre d'une approche où chaque atome du réseau est supposé se comporter comme un oscillateur harmonique classique. Si l'on tient compte de la quantification des vibrations (modèle d'Einstein), on trouve que  $C_V \rightarrow 0$  quand  $T \rightarrow 0$ , ce qui est en accord avec l'expérience. Toutefois,  $C_V$  tend vers zéro de manière exponentielle, *i.e.* plus vite que  $\propto T^3$ . La théorie de Debye, qui raffine l'approche du modèle d'Einstein, permet de calculer, de manière satisfaisante, la capacité calorifique de nombreux solides. On retrouve, à haute température, la loi de Dulong et Petit ; à basse température, on obtient une variation de la capacité calorifique en  $T^3$  conforme à l'expérience.

### 5.3.2 Conductivité thermique

Le transport de chaleur dans les cristaux peut avoir plusieurs origines et différents mécanismes microscopiques conduisent à l'équilibre thermique. Au cours du transport, la chaleur va de la partie chaude vers la partie froide.

La conduction thermique a pour vecteur un ou plusieurs types de « porteurs » d'énergie (photons, électrons, phonons, paires électrons-trous, excitons). Les électrons libres donnent la contribution essentielle au transport de chaleur pour les métaux. Pour les isolants, qui n'ont pas d'électrons libres, la conductivité thermique vient des phonons. Les phonons contribuent aussi largement à la conductivité thermique des cristaux semi-conducteurs. Pour ces derniers, il y a en plus une contribution électronique qui est d'autant plus importante que la température est plus élevée. En effet, le nombre d'électrons situés dans la bande de conduction augmente avec la température.

Les phonons interviennent à haute température et dans les matériaux diélectriques qui sont transparents aux grandes longueurs d'onde.

Le transport de chaleur peut aussi se faire par paires d'électrons-trous. Dans ce mécanisme, un phonon excite un électron de la bande de valence vers la bande de conduction. Le gaz d'électrons libres et de trous libres ainsi formés contribue à la conductivité thermique. Par ailleurs, un électron libre et un trou peuvent former une liaison et créer ce que l'on appelle un *exciton*.

### a) Approche classique

Afin de définir la conductivité thermique  $\kappa$  d'un cristal, considérons un barreau, orienté selon l'axe  $Ox$ , où règne un gradient de température  $\frac{dT}{dx}$ . Soit  $j_E$  le flux d'énergie (quantité d'énergie par unité de surface et par unité de temps) passant à l'abscisse  $x$ . La relation entre  $j_E$  et  $\frac{dT}{dx}$  peut s'écrire, dans le cadre d'une approximation linéaire :

$$j_E = -\kappa \frac{dT}{dx} \quad (5.12)$$

C'est la *loi de Fourier*. La conductivité thermique du silicium vaut, dans les conditions normales, 150 W/m/K, celle du cuivre 390 W/m/K. La conductivité thermique décroît lorsque la température augmente, typiquement de l'ordre de  $10^{-5}$  W/m/K. Sa valeur change aussi lors des changements de phase.

Nous allons évaluer  $\kappa$  dans le cas très simple d'un gaz parfait de porteurs tels que nous les avons définis ci-dessus. Pour cela, considérons la diffusion de chaleur le long de la direction  $x$  en supposant que la température diminue lorsque  $x$  augmente ( $dT/dx < 0$ ). Soit  $\ell$  le libre parcours moyen des porteurs que nous supposons suffisamment petit devant les dimensions du système. À l'abscisse  $x$ , la température vaut  $T(x)$ . Considérons un petit parallélépipède allant de  $x - \ell$  à  $x + \ell$ , dans la direction  $x$ , dont les faces parallèles au plan  $yz$  sont de surface unité. Nous avons  $T(x - \ell) > T(x + \ell)$  et :

$$T(x - \ell) = T(x) - \ell \frac{dT}{dx} \quad , \quad T(x + \ell) = T(x) + \ell \frac{dT}{dx} \quad (5.13)$$

Le flux d'énergie est dû au transport des porteurs dont l'énergie cinétique moyenne en  $x$  vaut  $\frac{3}{2}k_B T$ . Pour évaluer ce flux considérons le modèle très simple suivant lequel on suppose qu'il y a  $\frac{1}{6}$  des porteurs qui vont vers les  $x$  positifs. Cette approximation, très grossière, suppose que les porteurs forment un milieu isotrope et qu'ils ne se déplacent que selon les directions  $x$ ,  $y$  et  $z$ . Si  $\rho$  est la densité de porteurs, le flux selon  $+x$  vaut donc  $\frac{1}{6}\rho v$ , où  $v$  est la vitesse moyenne des porteurs. Ce schéma permet d'évaluer le flux d'énergie  $\Phi_1$  entrant en  $x - \ell$  dans le parallélépipède et le flux  $\Phi_2$  sortant en  $x + \ell$ . On trouve  $\Phi_1 = \frac{\rho v}{6} \times \frac{3}{2}k_B T(x - \ell)$  et  $\Phi_2 = \frac{\rho v}{6} \times \frac{3}{2}k_B T(x + \ell)$ . Le flux d'énergie traversant la surface unité parallèle à  $yz$  en  $x$  vaut donc :

$$j_E = \Phi_1 - \Phi_2 = -\frac{\rho v}{6} \frac{3}{2}k_B 2\ell \frac{dT}{dx} = -\frac{\rho v k_B \ell}{2} \frac{dT}{dx} \quad (5.14)$$

Ceci donne, pour la conductivité thermique,  $\kappa = \rho v k_B \ell / 2$ . Par ailleurs, l'énergie moyenne des porteurs vaut :

$$E = \rho \frac{3}{2}k_B T \quad \Rightarrow \quad c_v = \left( \frac{dE}{dT} \right) = \rho \frac{3}{2}k_B \quad (5.15)$$

On a ainsi pour la conduction thermique  $\kappa = c_v v \ell / 3$ .

### b) Mécanismes d'interaction des phonons

Le libre parcours moyen des phonons dépend habituellement fortement de leur énergie. Par exemple, pour le silicium, il passe de  $2,7 \times 10^{-6}$  m à 77 K à  $4,3 \times 10^{-8}$  m à 273 K. Il diminue donc fortement lorsque la température augmente. Le libre parcours moyen n'est pas le seul paramètre important pour la conductivité. Pour qu'il y ait transport de chaleur et équilibre thermique, il faut que le gaz de phonons puisse localement se relaxer vers l'équilibre. Ceci n'est possible que s'il existe des phénomènes dissipatifs qui se traduisent par une résistance à l'écoulement du flux de chaleur. S'il n'y avait pas de mécanisme de collision entre les phonons, le libre parcours moyen serait limité par les collisions du phonon avec la surface ou avec les défauts cristallins. Ces processus ne conduisent néanmoins pas à une thermalisation des phonons car ce sont des diffusions élastiques dans lesquelles l'énergie du phonon reste inchangée.

Dans une approche purement harmonique, il n'y a pas de collisions entre les phonons. La résistance au flux de chaleur est nulle et la conductivité thermique infinie pour un cristal parfait. On ne peut alors pas expliquer comment maintenir les deux extrémités d'un barreau à des températures différentes.

L'existence de collisions phonon-phonon provient d'effets anharmoniques. Les interactions phonon-phonon ne conduisent néanmoins pas toutes à des effets dissipatifs. En effet, la collision la plus simple, dénommée *mécanisme normal* ou *mécanisme N*, correspond à une interaction entre 3 phonons dont on peut écrire la règle de sélection sous la forme :

$$\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 = \mathbf{q}_3 \quad (5.16)$$

Dans ce mécanisme, 2 phonons de vecteurs d'onde  $\mathbf{q}_1$  et  $\mathbf{q}_2$  entrent en collision pour former un phonon de vecteur d'onde  $\mathbf{q}_3$ . Un tel processus n'est pas dissipatif car la quantité de mouvement totale du gaz de phonons reste constante.

Par contre, le mécanisme à 3 phonons faisant intervenir, dans la loi de conservation, un vecteur  $\mathbf{G}$  du réseau réciproque sont dissipatifs :

$$\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 = \mathbf{q}_3 + \mathbf{G} \quad (5.17)$$

Le processus (5.16) correspond au cas particulier de (5.17) pour lequel  $\mathbf{G} = 0$ . Les collisions pour lesquelles  $\mathbf{G} \neq 0$  sont appelées *processus umklapp* ou *mécanisme U*, qui signifie processus de retournement en allemand. Cette dénomination provient du fait qu'une collision de deux phonons ayant un vecteur d'onde dans la même direction peut, après un processus umklapp, donner un vecteur d'onde dans la direction opposée si  $\mathbf{G}$  est dans la direction opposée. Le mécanisme umklapp conduit à une variation importante de la quantité de mouvement et à la dissipation cherchée. Ces processus sont essentiellement responsables de la thermalisation des phonons et, par conséquent, de la valeur finie de la conductivité thermique. Ils sont peu probables à basse température mais leur probabilité augmente et devient importante aux températures supérieures à celle de Debye.

À basse température, le processus umklapp est peu probable. Le libre parcours moyen des phonons peut devenir comparable aux dimensions de l'échantillon. La conductivité thermique dépend alors de la taille de ce dernier (*effet de taille*). Par ailleurs, pour un cristal contenant un grand nombre d'imperfections volontaires<sup>4</sup> ou non, le libre parcours moyen peut aussi devenir de l'ordre de grandeur de la distance moyenne entre deux défauts.

## EXERCICES

---

**Exercice 5.1** Reprendre la section 5.1.1 en tenant compte des seconds voisins. On appellera  $\beta_1$  la constante relative aux premiers voisins et  $\beta_2$  celle relative aux seconds voisins.

1. Écrire l'énergie potentielle du système et les équations du mouvement.
2. Trouver la relation de dispersion en cherchant la solution sous la forme :  

$$u_n = A \exp(-i\omega t) \exp(iqna).$$
3. Quels sont les maxima de la relation de dispersion ? Présente-t-elle des maxima autres que ceux situés à la limite de la zone de Brillouin ?

---

**Exercice 5.2** Soit un cristal de semi-conducteur à gap direct : l'AsGa. Son gap vaut  $E_g = 1,43$  eV. La maille du réseau vaut  $a = 5,65$  Å et la vitesse de propagation du son dans le cristal vaut  $v = 5000$  m/s.

1. Calculer l'énergie et la longueur d'onde maximale d'un photon pouvant faire une transition de la bande de valence à la bande de conduction..
2. Calculer l'impulsion du photon
3. Sachant qu'un phonon se propage à la vitesse du son dans le cristal et que sa longueur d'onde est de l'ordre de la longueur de la maille de celui-ci, calculer son énergie et son impulsion en utilisant les mêmes expressions que pour le photon.
4. En comparant les propriétés du photon et du phonon, que peut-on dire des transitions dans le plan  $E-k$  ? Que se passe-t-il lors des transitions pour un semi-conducteur à gap indirect comme le silicium ?

---

4. On peut par exemple préparer des cristaux enrichis dans un des isotopes de l'atome du réseau. Ceci perturbe la périodicité du réseau et diminue la conductivité thermique.

## CORRIGÉS

### Exercice 5.1

1. L'énergie potentielle vaut :

$$U = \frac{1}{2} \sum_n [\beta_1(u_n - u_{n+1})^2 + \beta_2(u_n - u_{n+2})^2]$$

et les équations du mouvement sont :

$$m \frac{d^2 u}{dt^2} = \beta_1(u_{n-1} + u_{n+1} - 2u_n) + \beta_2(u_{n-2} + u_{n+2} - 2u_n)$$

2. Si l'on reporte la forme de la solution dans les équations du mouvement, on trouve :

$$\omega^2 = 4 \frac{\beta_1}{m} \sin^2 \frac{qa}{2} + 4 \frac{\beta_2}{m} \sin^2 \frac{qa}{2}$$

La courbe de dispersion est maximum lorsque :

$$\frac{d\omega}{dq} = \frac{1}{2\omega} \frac{d\omega^2}{dq} = \frac{a}{m\omega} (\beta_1 + 4\beta_2 \cos qa) \sin qa = 0$$

Les maxima correspondent à  $q = \pm\pi/a$ , *i.e.* sur la zone de Brillouin, et à  $\cos qa = -\beta_1/4\beta_2$ . Ces deux derniers maxima n'existent que si  $\beta_1 < 4\beta_2$ .

### Exercice 5.2

1.  $\lambda(\mu\text{m}) = \frac{1,24}{E_g(\text{eV})} = 0,87 \mu\text{m}$  car  $E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$

2.  $p = \frac{h}{\lambda} = 7,6 \times 10^{-28} \text{ kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$

3.  $E_{\text{phonon}} = \frac{h\nu}{\lambda} = 5,84 \times 10^{-21} \text{ J} = 0,037 \text{ eV}$ .  $p_{\text{phonon}} = \frac{h}{\lambda} = 1,17 \times 10^{-24} \text{ kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ . On voit que le phonon transporte moins d'énergie que le photon mais beaucoup plus d'impulsion.

4. Les transitions par photons peuvent être considérées comme verticales ( $\Delta k \simeq 0$ ). Les transitions par phonons changent surtout l'impulsion, donc le  $\Delta k$ . Cela explique que dans le cas où le semi-conducteur est à gap indirect, comme le silicium, que l'on fasse intervenir des phonons lors des excitations ou désexcitations.





## Chapitre 6

---

# Semi-conducteurs à l'équilibre

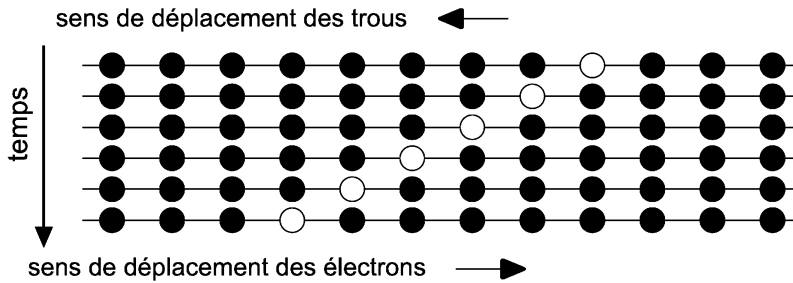
Nous allons, dans ce chapitre, nous concentrer sur les propriétés des semi-conducteurs car ceux-ci ont d'importantes applications. Leur résistivité varie typiquement entre  $10^{-3} \Omega \cdot \text{cm}$  et  $10^9 \Omega \cdot \text{cm}$  alors que celle des métaux est de l'ordre de  $10^{-6} \Omega \cdot \text{cm}$  et celle des isolants peut aller jusqu'à  $10^{22} \Omega \cdot \text{cm}$ .

### 6.1 NOTION DE TROU

Dans un semi-conducteur, le passage d'un électron de la bande de valence vers la bande de conduction se traduit par l'apparition d'un état inoccupé dans la bande de valence. Ces états inoccupés ont un rôle très important dans le domaine de la physique des semi-conducteurs ; on les appelle des *trous*.

Dans l'analogie hydraulique de la figure 4.6 (b), supposons qu'il y ait une petite bulle (électron) d'eau dans le tube supérieur et une petite bulle d'air (trou) dans le tube inférieur. En inclinant les deux tubes vers la droite, la goutte d'eau du tube supérieur se déplace, sous l'action de la pesanteur, dans cette même direction. Dans le tube inférieur, la bulle d'air se déplace vers la gauche ce qui induit un déplacement du liquide vers la droite. De la même manière, la conduction électrique d'un semi-conducteur a deux origines :

- les électrons qui se trouvent dans la bande de conduction,
- les « vides » ou *trous* présents dans la bande de valence. En effet, le mouvement des électrons restants se traduit très simplement par un mouvement d'électrons manquants, *i.e.* de trous. Ceci est illustré dans la figure 6.1.



**Figure 6.1** Propagation, sur un réseau unidimensionnel composé d'électrons (cercles pleins), d'un trou (cercle vide). Si chaque électron se déplace de gauche à droite d'une position, le trou, qui est une place vacante, se déplace de droite à gauche.

## 6.2 GAP

La *bande de valence* d'un semi-conducteur est, à température nulle, la dernière bande occupée par les électrons. La *bande de conduction* est la première bande vide à température nulle. Le *gap* est l'énergie minimum séparant la bande de valence de la bande de conduction. Il dépend de la température et varie d'environ 10 % entre 0 K et la température ordinaire. Cette dépendance a deux origines essentielles :

- la dilatation thermique du réseau cristallin qui modifie le potentiel périodique, donc la structure de bandes et la valeur du gap en énergie ;
- les vibrations du réseau car elles dépendent de la température et modifient aussi la structure de bandes, donc la valeur du gap.

Ces deux effets sont de grandeur comparable et conduisent à une variation linéaire en  $T$  sauf à basse température où cette variation est quadratique. Ainsi, pour le silicium, on a  $E_g(T = 0) = 1,17$  eV et  $E_g(T = 300 \text{ K}) = 1,12$  eV, avec une variation linéaire au-dessus de 200 K.

### 6.2.1 Nature du gap

Pour un cristal semi-conducteur tridimensionnel, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont caractérisés par une énergie  $E$  et un vecteur d'onde  $\mathbf{k}$ . Si, dans l'espace réciproque, ce maximum et ce minimum correspondent à la même valeur de  $\mathbf{k}$  (cas de l'*AsGa*), on dit que le semi-conducteur est à *gap direct*. Pour d'autres cristaux, le silicium en particulier, ce maximum et ce minimum correspondent à des valeurs de  $\mathbf{k}$  différentes et le semi-conducteur est dit à *gap indirect*.

La nature du gap est importante pour les application optroniques qui mettent en jeu à la fois des électrons et des photons. En effet, lors de la transition d'un électron de la bande de valence vers la bande de conduction — donc avec création d'un trou dans la bande de valence et d'un électron dans la bande de conduction — ou lors de la

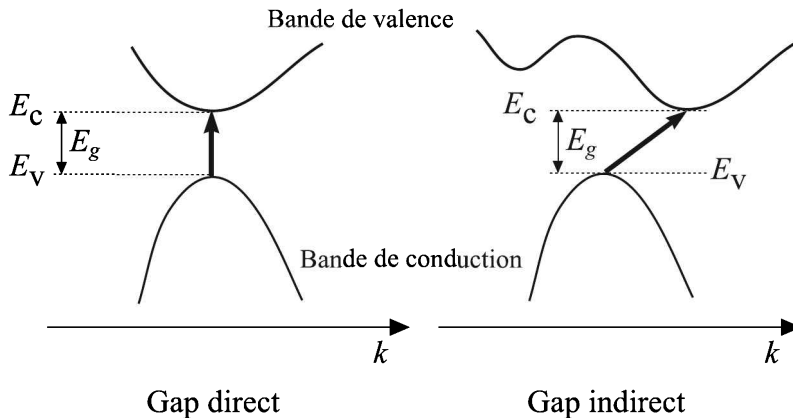
recombinaison d'un électron de la bande de conduction avec un trou de la bande de valence, il faut conserver :

- l'énergie (relation scalaire),
- et l'impulsion (relation vectorielle).

Lorsqu'un semi-conducteur est à gap direct, la transition d'un électron de la bande de valence vers la bande de conduction se fait à quantité de mouvement  $\hbar \mathbf{k}$  constante puisque l'impulsion d'un photon est négligeable devant celle de l'électron. La conservation de l'impulsion est donc automatiquement assurée. Cette transition s'observe, par exemple, lorsque le semi-conducteur absorbe un photon de longueur d'onde :

$$\lambda(\text{nm}) = \frac{1,240}{E_g} (\text{eV})$$

où  $E_g$  est la valeur du gap. De même, un électron de la bande de conduction peut facilement se recombiner avec un trou en émettant un photon d'énergie  $\lambda$  ; c'est ce que l'on appelle une transition radiative. Ce phénomène est utilisé dans les diodes électroluminescentes et les diodes laser. Le mécanisme de transition directe est schématisé dans la partie gauche de la figure 6.2.



**Figure 6.2** Différence entre une transition directe et une transition indirecte.

Pour un semi-conducteur à gap indirect, comme le silicium, les choses sont plus complexes. Pour qu'un électron de conduction, d'impulsion  $\hbar \mathbf{k}$ , se recombiner avec un trou d'impulsion nulle de la bande de valence, il faut, pour conserver l'impulsion, faire intervenir les phonons du réseau (l'énergie du phonon créé est typiquement de l'ordre de 0,01 à 0,03 eV). Un phonon participe au processus de recombinaison pour assurer la conservation de l'impulsion (grâce à l'impulsion du réseau cristallin). Ceci rend la combinaison radiative beaucoup moins probable que dans le cas des semi-conducteurs

à gap direct. Par conséquent, le silicium, tout comme le germanium qui est aussi un semi-conducteur à gap indirect, est un très mauvais émetteur de lumière.

Tout ceci s'applique aussi à l'excitation d'un électron de la bande de valence vers la bande de conduction. Ainsi, dans le cas d'un gap indirect, on ne peut exciter optiquement le semi-conducteur, à  $T = 0$  K, que s'il intervient un phonon de vecteur d'onde  $K$ .

Le mécanisme de transition indirecte a donc une plus faible probabilité de se produire que le processus direct, car il met en jeu 3 particules (l'électron, le photon et le phonon) au lieu de deux (l'électron et le photon). Ceci explique en particulier pourquoi l'AsGa est un bon matériau pour les applications opto-électroniques (*i.e.* mettant en jeu des photons et des électrons) alors que le silicium est moins bon. Lorsque la température augmente, depuis 0 K, le nombre de phonons augmente fortement et la probabilité d'excitation optique croît aussi.

### 6.2.2 Influence des défauts et des impuretés

Malgré les très grandes puretés atteintes dans la fabrication des semi-conducteurs, et particulièrement du silicium, il existe toujours des défauts dans le cristal (lacunes, dislocations, ...). Il reste aussi, même en très faibles quantités, des impuretés constituées d'atomes autres que ceux du semi-conducteur considéré. Tout ceci conduit à la présence de niveaux d'énergie (localisés dans l'espace) situés dans la bande interdite du semi-conducteur. Selon la nature de l'imperfection du cristal, un tel niveau va se comporter comme un *centre accepteur* ou *donneur* d'électrons. Ces niveaux localisés, situés dans la bande interdite, sont appelés « *centres de génération-recombinaison* ». Ils peuvent jouer le rôle de relai dans les excitations du semi-conducteur. En effet, comme ils sont situés dans la bande interdite, ils mettent en jeu des énergies plus faibles que celles correspondant à une transition de bande à bande.

Lors d'une recombinaison dans un tel centre, l'énergie disponible peut conduire à un photon (recombinaison radiative), à l'excitation d'un électron (effet Auger) ou d'un trou ; elle peut servir enfin à exciter des phonons (vibrations du cristal). Ces phénomènes de recombinaison (appelés recombinaisons SRH (Shockley, Hall, Read)), mettant en jeu les centres de recombinaison, sont particulièrement importants dans le cas des semi-conducteurs à gap indirect. Ils sont maximum pour les centres dont l'énergie est située au milieu de la bande interdite. C'est le cas en particulier du silicium pour lequel la majeure partie des recombinaisons se fait selon ce processus.

## 6.3 MASSE EFFECTIVE

Puisque les électrons sont des fermions, la plupart des propriétés électroniques et optiques des semi-conducteurs sont en grande partie déterminées par les propriétés des électrons proches du bord des zones de Brillouin, *i.e.* aux endroits où la diffraction de Bragg est maximum. Ceci correspond au voisinage du bord supérieur de la bande

de valence et du bord inférieur de la bande de conduction. Cette remarque permet de faire des simplifications dans le traitement des bandes d'énergie autour de ces extrema. Pour cela, nous allons faire un développement de Taylor de la relation de dispersion  $E(\mathbf{k})$  qui va conduire à la notion de masse effective.

### 6.3.1 Notion de masse effective

Le relation de dispersion permet de caractériser le milieu dans lequel se propage l'onde ou le corpuscule. Pour un électron libre dans le vide, celle-ci s'écrit  $E(\mathbf{k}) = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / m$ , où  $m$  est la masse de l'électron.

Prenons à présent le cas d'un électron dans un cristal. La relation de dispersion  $E = E(\mathbf{k})$  décrit alors l'influence du potentiel périodique créé par les ions situés aux nœuds du réseau cristallin. Si l'on applique un champ électrique  $\vec{E}$  ou magnétique  $\vec{B}$  au cristal, l'électron considéré sera accéléré par rapport au réseau comme s'il avait une masse  $m^*$  dont la valeur est différente de celle d'un électron libre. On appelle *masse effective* cette quantité  $m^*$ . Elle peut être très différente de la masse de l'électron libre  $m$  ; elle est en général positive mais peut être négative. Elle correspond au fait que l'électron n'est plus libre mais influencé par l'ensemble du réseau cristallin. C'est, bien sûr, une approximation, mais elle est très utile pour décrire les propriétés des semi-conducteurs. L'électron lui-même ne doit plus être considéré comme une particule mais comme une quasiparticule, *i.e.* un électron libre « habillé » par le reste du milieu<sup>1</sup>.

La fonction d'onde de l'électron libre est une onde plane  $\propto \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$ . Lors d'une collision de l'électron avec une autre particule, l'impulsion est conservée. Dans un cristal parfait, l'électron devient une quasiparticule. Sa fonction d'onde est donnée par le théorème de Bloch ( $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  où  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  a la même périodicité que le cristal). L'impulsion  $\hbar \mathbf{k}$  de la quasiparticule est appelée le *moment cristallin*. C'est la quantité de mouvement de l'électron dans le cristal. Elle intègre les propriétés de l'électron et l'influence du cristal sur celui-ci. La relation de dispersion devient alors une expression plus compliquée  $E = E(\mathbf{k})$ . Lorsque l'on applique un champ de force extérieur, l'électron du cristal réagit comme s'il avait une quantité de mouvement  $\hbar \mathbf{k}$ . Lors d'une collision de l'électron du cristal avec une particule ou une quasiparticule, la quantité de mouvement est, pour la plupart des mécanismes, conservée. Toutefois, il en existe quelques uns où elle ne l'est pas. Le nombre d'onde  $k = |\mathbf{k}|$  est relié à la longueur d'onde  $\lambda$  de l'électron par  $k = 2\pi/\lambda$  et  $\lambda$  est bornée inférieurement par l'espacement minimum entre deux atomes du réseau.

1. Pour comprendre la notion de quasiparticule on peut imaginer un cavalier galopant dans une région très poussiéreuse. Un observateur voit de loin un nuage de poussière, contenant le cavalier, mais pas le cavalier lui-même. Dans cette métaphore, le cavalier joue le rôle de la particule et le nuage de poussière (avec le cavalier) vu par l'observateur, celui de la quasiparticule. Le cavalier est « habillé » par son interaction avec le milieu (ici la poussière).

### 6.3.2 Masse effective et relation de dispersion

Pour un semi-conducteur à l'équilibre ou voisin de celui-ci, les niveaux inoccupés sont proches du sommet de la bande de valence. De même, les niveaux occupés dans la bande de conduction sont voisins du bas de celle-ci. Ceci permet de faire une approximation parabolique (harmonique) de ces bandes au voisinage de leur extremum.

Considérons la bande de conduction. Soit  $\mathbf{k}_0$  la position du minimum de  $E(\mathbf{k})$ . L'approximation harmonique consiste à remplacer la bande de valence au voisinage de  $\mathbf{k}_0$  par le paraboloïde osculateur en  $\mathbf{k}_0$ . Supposons, pour simplifier la discussion, le système suffisamment symétrique pour que ce paraboloïde soit de révolution. L'approximation harmonique est un développement de Taylor jusqu'au second ordre en  $\mathbf{k}$ , soit :

$$E(\mathbf{k}) \approx E(\mathbf{k}_0) + \left( \frac{d^2 E(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}^2} \right)_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2 = E(\mathbf{k}_0) + A(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2 \quad (6.1)$$

où  $A$  est une constante. Le fait que  $E(\mathbf{k})$  soit minimum en  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$  entraîne que  $A > 0$  et que le terme linéaire du développement soit nul. On peut alors définir la masse effective de l'électron par la relation :

$$\frac{\hbar^2}{2m_e^*} = A = \left( \frac{d^2 E(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}^2} \right)_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} \text{ soit } \left( \frac{1}{m_e^*} \right) = \frac{2}{\hbar^2} \frac{d^2 E(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}^2} \quad (6.2)$$

et écrire :

$$E(\mathbf{k}) \approx E(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2 \quad (6.3)$$

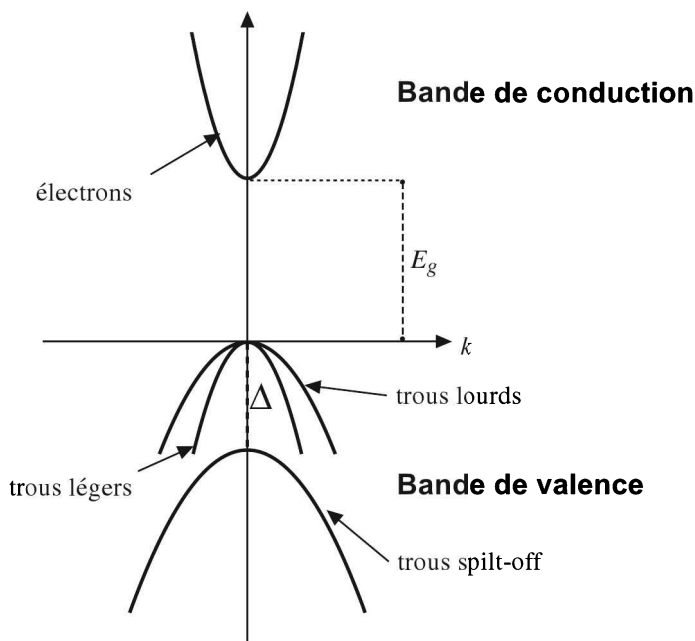
La vitesse de groupe au voisinage de  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$  vaut alors :

$$\mathbf{v}_g = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{d\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \approx \frac{\hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)}{m_e^*}$$

Lorsque  $\mathbf{k}_0 = 0$ , ce qui est le cas de l'*AsGa* par exemple, on retrouve les expressions de l'électron libre à ceci près que la masse de celui-ci,  $m$ , est remplacée par la masse effective  $m_e^*$ . La masse effective est donc associée à la courbure de  $E(\mathbf{k})$  au voisinage du minimum. Si cette courbure, appelée aussi rigidité dans le cas d'un oscillateur harmonique, est grande, la masse effective est petite et réciproquement. Ceci est illustré sur la figure 6.3.

Nous avons considéré une bande de conduction suffisamment symétrique pour pouvoir utiliser la relation (6.3). Ce n'est souvent pas le cas et toutes les directions de l'espace des  $\mathbf{k}$  ne sont pas équivalentes en partant de  $\mathbf{k}_0$ . Dans cette situation, le développement de Taylor jusqu'au second ordre s'écrit :

$$E(\mathbf{k}) \approx E(\mathbf{k}_0) + \sum_{i,j} \left( \frac{d^2 E(\mathbf{k})}{dk_i dk_j} \right)_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} (k_i - k_{0i})(k_j - k_{0j}) \quad (6.4)$$



**Figure 6.3** Illustration très simplifiée des bords de bandes pour un semi-conducteur à gap direct. Pour la bande de valence, il y a deux bandes dégénérées qui correspondent aux trous légers et lourds. Une troisième bande, située plus bas en énergie, correspond à une levée de dégénérescence due à l'interaction spin-orbite ; ce sont les trous split-off. Le couplage spin-orbite peut parfois conduire à un écart,  $\Delta$ , entre les sous-niveaux, supérieur au gap (dans *InSb*, par exemple,  $\Delta = 0,9$  eV alors que  $E_g = 0,23$  eV). Ce n'est pas le cas pour le silicium pour lequel  $\Delta = 0,04$  eV alors que  $E_g = 1,12$  eV à la température ordinaire.

où les indices  $i, j$  repèrent les composantes  $x, y$  et  $z$  des vecteurs d'onde. La masse effective est définie par la relation :

$$\left( \frac{1}{m_e^*} \right)_{ij} = \frac{2}{\hbar^2} \left( \frac{d^2 E(\mathbf{k})}{dk_i dk_j} \right)$$

(si  $\mathbf{k}_0 = 0$ ). L'inverse de la masse effective, et donc aussi cette dernière, est un tenseur<sup>2</sup> dont nous avons donné ci-dessus les composantes  $ij$ . Ceci revient à dire que la masse effective de l'électron dépend de la direction dans laquelle il se propage<sup>3</sup>.

2. Pour certains matériaux, les termes non diagonaux du tenseur de masse effective ( $i \neq j$ ) sont grands. Cela se traduit par le fait qu'un champ électrique extérieur appliqué dans une direction conduit à une accélération dans une autre direction. Lorsque les termes non diagonaux sont nuls, on parle de *masse effective scalaire*.

3. Une métaphore permettant de comprendre cette notion d'anisotropie de la masse effective consiste à considérer une personne qui part du fond d'une vallée et qui décide de quitter celle-ci. Si elle va vers le



L'approximation harmonique qui vient d'être faite est d'autant meilleure que la bande est proche d'un paraboloïde. Ceci peut d'ailleurs s'étendre assez loin de  $\mathbf{k}_0$ . Lorsque cette approximation n'est plus valable, on la prolonge souvent en supposant que la masse effective dépend aussi de l'énergie.

Nous avons considéré jusqu'ici le cas de la bande de conduction d'un semi-conducteur contenant quelques électrons. Nous allons maintenant nous intéresser à la bande de valence dans laquelle quelques électrons sont partis, laissant les trous que nous avons définis plus haut. Nous supposons que le matériau est isotrope au voisinage du maximum de la bande de valence car il n'y a pas de difficulté conceptuelle à supposer que ce n'est pas le cas. Nous pouvons, au voisinage du maximum  $\mathbf{k}_0$  de la bande de valence, développer  $E(\mathbf{k})$ . Ce développement se rapporte aux électrons et si l'on définit la masse effective par (6.2), nous voyons qu'elle est négative. C'est la masse effective d'un électron au voisinage du haut de la bande de valence. Plutôt que de considérer un électron (de charge négative) avec une masse effective négative, il est plus simple de considérer un trou (de charge positive) avec une masse effective  $m_h^* = -m_e^*$  positive. Les équations du mouvement dans un champ électromagnétique sont les mêmes pour un électron de masse effective négative que pour un trou de masse effective positive.

Dans la dynamique des électrons et des trous au voisinage des extrema de bandes, on peut ainsi utiliser les équations de la dynamique classique en remplaçant la masse de l'électron par sa masse effective<sup>4</sup>.

## 6.4 STRUCTURE DES BANDES D'ÉNERGIE

La structure réelle des bandes d'énergie est beaucoup plus complexe que les simples schémas que l'on a l'habitude de présenter pour comprendre les propriétés des semi-conducteurs. Néanmoins, ceux-ci sont suffisants pour comprendre la physique de base mise en jeu. Dans cette section, nous allons présenter la structure des bandes d'énergie de deux semi-conducteurs, celle de l'arséniure de gallium, qui est une bonne illustration d'un semi-conducteur à gap direct, et celle du silicium, qui est un semi-conducteur à gap indirect.

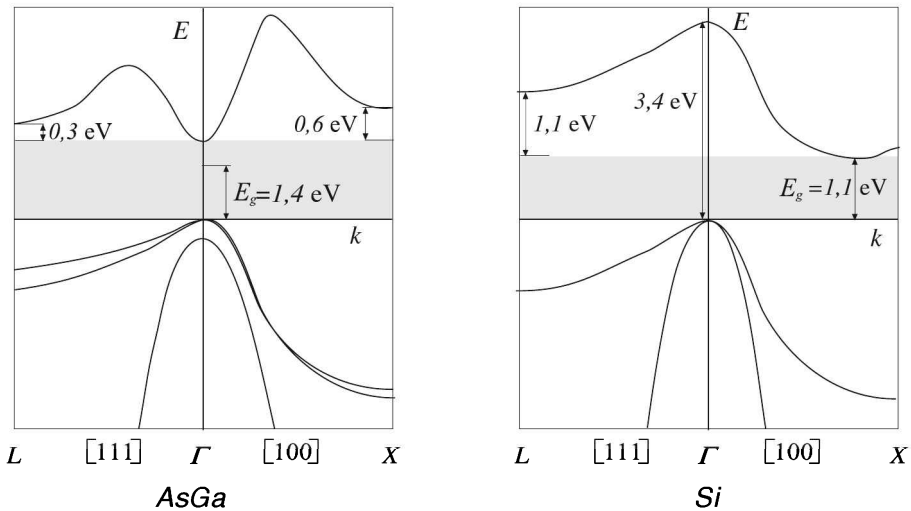
---

nord, elle doit prendre avec elle un sac à dos de 10 kg, si c'est vers le sud son sac pèsera 20 kg et il sera de 30 kg vers l'est et l'ouest.

4. Les masses effectives  $m_e^*$  et  $m_h^*$  introduites ont été déduites des propriétés des électrons sur une surface d'énergie constante de la structure de bandes. Elle sont donc reliées à la densité de niveaux. Lorsque l'on applique un champ électrique extérieur au cristal semi-conducteur, les électrons répondent à ce champ avec une certaine inertie caractérisée par une masse effective  $m_\sigma^*$ , appelée masse effective de conductivité. Cette dernière n'est égale à la masse effective  $m^*$  que pour les semi-conducteurs à gap direct comme l'*AsGa*. Ce n'est par contre pas le cas pour le silicium pour lequel  $m_\sigma^* = 3 / \left( \frac{2}{m_t^*} + \frac{1}{m_l^*} \right)$ , où  $m_t^*$  et  $m_l^*$  sont respectivement les masses effectives déduites de la densité de niveaux dans le sens transversal et longitudinal. La masse effective est différente pour les électrons et les trous.

### 6.4.1 Arséniure de gallium

L'*AsGa* est un semi-conducteur à gap direct. Le minimum de la bande de conduction est situé en  $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$ , i.e. au point  $\Gamma$  (cf. figure 4.1). Au voisinage de ce point, les surfaces d'énergie constante sont des sphères centrées en  $\Gamma$ . Pour cette raison, on qualifie l'*AsGa* de *semi-conducteur univallée*. Ce schéma est observé pour la plupart des semi-conducteurs III–V et II–VI<sup>5</sup>. La structure de bandes de l'*AsGa* est indiquée sur la figure 6.4. On retrouve, pour la bande de valence, la même structure que celle présentée dans la figure 6.3, i.e. trois bandes correspondant respectivement aux trous légers ( $m_h^* \simeq 0,1m$ ), aux trous lourds ( $m_h^* \simeq 0,45m$ ) et à la bande « split-off » ( $m_h^* \simeq 0,2m$ ). La valeur assez grande du déplacement spin orbite ( $\Delta \simeq 0,34$  eV) fait que cette dernière n'intervient en général pas dans les propriétés électroniques et optoélectroniques de l'*AsGa*.



**Figure 6.4** Structure simplifiée des bandes d'énergie de l'*AsGa* selon les directions [100] et [111] du cristal. Le point  $\Gamma$  est situé en  $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$ , le point  $X$  en  $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{a}(1, 0, 0)$  et le point  $L$  en  $\mathbf{k} = \frac{\pi}{a}(1, 1, 1)$ . Le gap de l'*AsGa* est direct et celui du silicium indirect. On notera que ces figures ne sont pas à l'échelle.

Dans le diagramme de la figure 6.4, on remarque l'existence de deux minima dont l'énergie est supérieure à celle du point  $\Gamma$ . Il s'agit de la vallée située en  $L$  et de celle située en  $X$  ; elles sont respectivement positionnées à 0,3 eV et 0,58 eV au-dessus de la vallée  $\Gamma$ . Par suite de la symétrie du cristal, il y a 4 vallées équivalentes de type  $L$  (cf. figure 4.1).

5. Les semi-conducteurs III–V sont constitués d'un élément de la colonne III de la classification périodique et d'un élément de la colonne V. Les éléments II–VI sont constitués d'un élément de la colonne II et d'un élément de la colonne VI.

### 6.4.2 Silicium

Le minimum de la bande de conduction est situé au point d'abscisse  $(0,0, k_0 = 0,85 k_X)$ , où  $k_X$  est l'abscisse du point  $X$  de la direction  $\Delta$  de la figure 4.1 (direction  $[100]$ ). Par suite de la symétrie du cristal, il existe 6 directions équivalentes qui sont  $[100]$ ,  $[\bar{1}00]$ ,  $[010]$ ,  $[0\bar{1}0]$ ,  $[001]$  et  $[00\bar{1}]$ . Le silicium présente donc des minima égaux en énergie dans ces directions. On qualifie pour cette raison le silicium de semi-conducteur multivallées. Au voisinage des minima, la variation de  $E(\mathbf{k})$  n'est pas isotrope ; elle est plus rapide dans le plan perpendiculaire à l'axe  $\Delta$ . Les surfaces d'énergie constante au voisinage des minima sont des paraboloïdes de révolution autour des axes  $\Delta$ .

## 6.5 DENSITÉ D'ÉTATS

La densité d'état intervient dans le calcul de nombreuses quantités physiques des semi-conducteurs. Elle est définie comme le nombre de micro-états par unité de volume et d'énergie ; nous la noterons  $\rho(E)$ . Nous allons calculer  $\rho(E)$  pour un gaz d'électrons indépendants. Il nous sera ensuite aisé d'utiliser les expressions obtenues pour les porteurs de charge, dont l'énergie est proche du bord des bandes, en utilisant la notion de masse effective. Pour des électrons libres :

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \implies dE = \frac{2\hbar^2 k dk}{2m} = \hbar \sqrt{\frac{2E}{m}} dk$$

Le nombre de micro-états dans le volume  $V$  ayant leur vecteur d'onde compris entre  $\mathbf{k}$  et  $\mathbf{k}+d\mathbf{k}$  est obtenu en évaluant le volume dans l'espace de phase et en divisant par  $h^3$ . Ce volume (cf. section 2.2.1) est obtenu en considérant l'espace compris entre deux sphères de rayon  $p$  et  $p + dp$  (rappelons que  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ ) que l'on multiplie par le volume  $V$  de l'espace ordinaire. Il faut ensuite tenir compte, dans le dénombrement, de la dégénérescence du spin ( $= 2$ ). On obtient :

$$2 \times \frac{4\pi p^2 dp}{h^3} V = 2 \times \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} V = \frac{k^2 dk}{\pi^2} V \quad (6.5)$$

Le nombre de micro-états compris entre  $E$  et  $E + dE$  et la densité d'état valent :

$$\rho(E)dE = \frac{k^2 dk}{\pi^2} = \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} dE \quad \text{ou} \quad \rho(E) = \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} \quad (6.6)$$

Les électrons sont parfois confinés dans des structures à 2 dimensions ou à une dimension (cf. chapitre 10). Il est intéressant d'évaluer  $\rho(E)$  dans ces deux cas. À deux dimensions, on a :

$$\rho(E)dE = 2 \times \frac{2\pi k dk}{(2\pi)^2} = 2 \times \frac{2m}{(2\pi)^2 \hbar^2} dE \implies \rho(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2} \quad (6.7)$$

À une dimension :

$$\rho(E)dE = 2 \times \frac{dk}{2\pi} = 2 \times \sqrt{\frac{m}{2E}} \frac{1}{\pi\hbar} dE \implies \rho(E) = \frac{\sqrt{2m}}{\pi\hbar} \frac{1}{\sqrt{E}} \quad (6.8)$$

La dépendance de la densité d'états en fonction de l'énergie est différente selon la dimensionnalité du système. À trois dimensions, elle varie comme  $E^{1/2}$ , à deux dimensions elle est constante et à une dimension elle varie comme  $E^{-1/2}$ .

## 6.6 DENSITÉ D'ÉLECTRONS ET DE TROUS

Nous allons maintenant considérer un semi-conducteur à la température  $T$ . Soit  $E_C$  l'énergie minimum de la bande de conduction et  $E_V$  l'énergie maximum de la bande de valence. À  $T = 0$  K, tous les électrons sont dans la bande de valence. Lorsque  $T$  augmente, certains d'entre-eux, ceux qui ont une énergie proche de  $E_V$ , passent dans la bande de conduction, au voisinage de  $E_C$ . En effet, les excitations les plus probables sont celles qui demandent le moins d'énergie, donc celles qui sont à peine supérieures à  $E_C - E_V$ . Pour calculer  $n_e$ , le nombre d'électrons par unité de volume dans la bande de conduction :

- on évalue le nombre  $\rho(E)dE$  de micro-états dont le vecteur d'onde est compris entre  $E$  et  $E + dE$  ;
- on multiplie  $\rho(E)dE$  par la probabilité  $f(E)$  d'occupation d'un état par un électron ;
- enfin, on intègre sur l'espace  $E$  correspondant à la bande de conduction (BC), *i.e.* sur  $E > E_C$ . Ceci conduit à :

$$n_e = \int_{BC} \rho(E) f(E) dE = \int_{E_C}^{\infty} \rho(E) f(E) dE \quad (6.9)$$

Le raisonnement est analogue pour calculer  $n_h$ , le nombre de trous par unité de volume dans la bande de valence, à ceci près que la probabilité d'obtenir un trou d'énergie  $E$  est  $1 - f(E)$  et que l'intégration se fait sur la bande de valence (BV) :

$$n_h = \int_{BV} \rho(E) (1 - f(E)) dE \quad (6.10)$$

La probabilité d'occupation d'un niveau,  $f(E)$ , est donnée par la distribution de Fermi-Dirac :

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp[(E - E_F)/k_B T]}$$

Rappelons encore une fois que  $E_F$ , dénommée énergie de Fermi dans le domaine des semi-conducteurs, est en fait le *potentiel chimique* du système.

La densité d'état dans la bande de conduction s'obtient à partir de la forme de  $\rho(E)$  obtenue dans la section 6.5 (équation (6.6)) en utilisant la masse effective de l'électron pour tenir compte des effets de milieu. Celle-ci est supposée constante puisque l'énergie des électrons est proche de  $E_C$ . Par ailleurs, dans l'équation (6.6), il faut remplacer  $E$  par  $E - E_C$ , puisque l'origine des énergies de la bande de conduction est en  $E_C$ . L'expression de  $n_e$  est donc :

$$n_e = \frac{\sqrt{2} (m_e^*)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_{E_C}^{\infty} \frac{(E - E_C)^{1/2} dE}{\exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) + 1} \quad (6.11)$$

Pour un semi-conducteur intrinsèque (*i.e.* pur), l'énergie de Fermi est loin du bord de la bande de conduction, entre  $E_V$  et  $E_C$ . Ceci implique que  $\exp((E - E_F)/k_B T) \gg 1$ . On peut donc négliger l'unité devant l'exponentielle ; c'est l'approximation de Boltzmann basée sur le fait qu'il y a peu d'électrons (de trous) dans la bande de conduction (de valence) par rapport au nombre de micro-états disponibles. Elle est valable lorsque  $n_e$  est petit, typiquement inférieur à  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Compte tenu de ces hypothèses, on déduit de (6.11) :

$$n_e = 2 \left( \frac{m_e^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{E_F - E_C}{k_B T}\right) = N_e \exp\left(\frac{E_F - E_C}{k_B T}\right) \quad (6.12)$$

où l'on a introduit la quantité  $N_e = 2 (m_e^* k_B T / 2\pi \hbar^2)^{3/2}$  qui est la *densité effective d'états* au bord de la bande de conduction. C'est le nombre par lequel il faut multiplier la probabilité d'occupation du niveau pour obtenir  $n_e$ . En fait, les hypothèses que nous avons faites reviennent à considérer les électrons de la bande de conduction comme un gaz parfait de particules de masse  $m_e^*$ , d'énergie  $E_C$ , à la température  $T$ . Le facteur 2, au début de la deuxième ligne de l'équation (6.12), provient de la dégénérescence liée au spin des électrons.

On obtient, par un raisonnement tout à fait analogue, le nombre de trous par unité de volume dans la bande de valence en partant de l'équation (6.10) et en faisant les mêmes hypothèses que ci-dessus qui sont valables pour les semi-conducteurs intrinsèques. Cela donne :

$$n_h = 2 \left( \frac{m_h^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{k_B T}\right) = N_h \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{k_B T}\right) \quad (6.13)$$

où  $N_h = 2 (m_h^* k_B T / 2\pi \hbar^2)^{3/2}$  est la *densité effective d'états* au bord de la bande de valence.

Pour un porteur de charge de masse effective  $m^*$  ( $m_e^*$  ou  $m_h^*$ ), nous avons, si  $m$  est la masse de l'électron libre et  $T$  la température évaluée en kelvins, l'expression

suivante pour  $N$  ( $N_e$  ou  $N_h$ ) :

$$N = 2,5 \left( \frac{m^*}{m} \right)^{3/2} \left( \frac{T}{300 \text{ K}} \right)^{3/2} \times 10^{19} \text{ cm}^{-3} \quad (6.14)$$

Comme les facteurs exponentiels intervenant dans le calcul du nombre de porteurs de charge sont toujours inférieurs à l'unité, le nombre maximum de porteurs, dans le cas *non dégénéré*, est toujours inférieur à  $10^{18}$ – $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ .

Dans le calcul du nombre de porteurs de charge, il faut prendre les masses effectives calculées à partir des densités d'états<sup>6</sup>.

## 6.7 SEMI-CONDUCTEURS INTRINSÈQUES

Un semi-conducteur est dit « *intrinsèque* » s'il est à l'état pur. Dans ce cas, le nombre d'électrons dans la bande de conduction est égal au nombre de trous dans la bande de valence. Par conséquent,  $n_e = n_h$  et l'on déduit de (6.12) et de (6.13) que l'énergie de Fermi du système intrinsèque,  $E_F^{(i)}$  vaut :

$$E_F = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{3}{4} k_B T \text{ Log} \left( \frac{m_h^*}{m_e^*} \right) \quad (6.15)$$

Le niveau de Fermi d'un système intrinsèque est donc proche du milieu de la bande interdite. Dans l'hypothèse, souvent faite, selon laquelle la masse effective des électrons est égale à celle des trous ( $m_e^* = m_h^*$ ), on a :

$$E_F \simeq (E_C + E_V) / 2 \quad (6.16)$$

6. Pour le Si, il y a six vallées équivalentes et les surfaces d'énergie constante sont des ellipsoïdes qui conduisent à une anisotropie de la masse effective. Celle-ci vaut  $m_\ell^*$  dans la direction longitudinale, et  $m_t^*$  dans les 2 directions transverses. La masse effective équivalente que l'on peut choisir, pour se ramener à un problème isotrope, est  $m_e = (m_\ell^* m_t^* m_t^*)^{1/3} = (m_\ell^* m_t^{*2})^{1/3}$ . Par ailleurs, le nombre de vallées, *i.e.* le nombre de zones dans lesquelles l'énergie est la même, est de six. Il faut donc multiplier la densité d'état d'une vallée par 6 si l'on veut tenir compte des 6 vallées. Comme la masse effective intervient comme  $(m_e^*)^{3/2}$  dans l'équation (6.12), nous voyons que l'on peut inclure ce facteur dans la valeur de la masse effective et ne tenir compte que d'une seule vallée. Dans ce cas, il faut prendre pour masse effective la valeur  $(6)^{2/3} (m_\ell^* m_t^{*2})^{1/3}$ . Ce choix permet de supposer le système isotrope et de ne tenir compte que d'une seule vallée.

Le choix de la masse effective des trous est plus complexe que pour les électrons. Nous avons vu (*cf.* figure 6.3) que la bande de valence est composée de deux sous-bandes, l'une associée aux trous légers, l'autre aux trous lourds (la bande split-off n'intervient pas pour le silicium). Soit  $m_{lh}^*$  et  $m_{hh}^*$  les masses effectives des trous légers et lourds déduites de la densité d'état. Pour tenir compte de l'existence de ces deux types de trous, on choisit, semi-empiriquement,  $m_h^* = \left( m_{lh}^{*3/2} + m_{hh}^{*3/2} \right)^{2/3}$ . La raison de ce choix provient de la variation en puissance  $m^{3/2}$  de la densité d'états (équation (6.6)). Par conséquent, on écrit  $m_h^{*3/2} = m_{lh}^{*3/2} + m_{hh}^{*3/2}$ , d'où l'expression choisie.

qui indique que l'énergie de Fermi est située au milieu de la bande interdite. Pour de nombreux semi-conducteurs (mais pas le silicium),  $m_h^* > m_e^*$ . Leur niveau de Fermi est situé légèrement au-dessus du milieu de la bande interdite. Posons  $n_i = n_e = n_h$ . On a, en utilisant (6.12) et (6.13) :

$$\begin{aligned} n_i^2 &= n_e n_h = N_e N_h \exp(-E_g/k_B T) \\ &= 4 \left( \frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^3 (m_e^* m_h^*)^{3/2} \exp(-E_g/k_B T) \end{aligned} \quad (6.17)$$

La concentration de porteurs intrinsèques vaut par conséquent :

$$n_i = 2 \left( \frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_e^* m_h^*)^{3/4} \exp(-E_g/2k_B T) \quad (6.18)$$

Cette relation montre que la concentration intrinsèque dépend du gap  $E_g$  et qu'elle augmente avec la température comme  $T^{3/2}$ . On retrouve le fait que la conductivité d'un semi-conducteur augmente avec la température. L'équation (6.18) conduit à :

$$\begin{aligned} n_i &= 2,5 (m_e^*/m)^{3/4} (m_h^*/m)^{3/4} (T/300 \text{ K})^{3/2} \\ &\quad \exp(-E_g/2k_B T) \times 10^{19} \text{ cm}^{-3} \end{aligned} \quad (6.19)$$

Le nombre de porteurs est faible à température ordinaire ( $\simeq 10^{10}$  par  $\text{cm}^{-3}$  pour le silicium) comparé au nombre d'électrons dans les métaux (typiquement de l'ordre de  $10^{21}$  par  $\text{cm}^{-3}$ ). La relation (6.17),  $n_e n_h = n_i^2$ , est la *loi d'action de masse*. Elle est satisfaite quelles que soient les valeurs de  $n_e$  et  $n_h$ .

## 6.8 DOPAGE

Les propriétés électriques d'un cristal semi-conducteur sont profondément modifiées si l'on remplace certains atomes du réseau par des atomes ayant, par rapport à l'atome substitué, un électron en plus ou en moins dans son cortège électronique. On désigne ceci sous le nom de *dopage*. Ce dernier consiste à introduire des impuretés dans le cristal qui vont avoir pour conséquence de créer des niveaux d'énergie dans la bande interdite<sup>7</sup>. Un semi-conducteur dopé est appelé semi-conducteur *extrinsèque*.

Prenons le cas du silicium situé dans la colonne IV de la classification périodique. On peut introduire dans son cristal des impuretés (appelées dopants) appartenant à

7. Dans tous les cas, la concentration du dopant est faible,  $10^{16}$  ou  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  pour donner un exemple. De plus, chaque dopant a une concentration limite qui dépend de sa nature, du cristal semi-conducteur à doper et de la température. Par exemple, cette concentration limite est de l'ordre de  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$  pour du bore (B) dans du silicium à 1 000 °C. Le P et l'As ont des limites à peine supérieures dans les

la colonne III (du bore, par exemple) ou V (du phosphore, par exemple). Ces dopants doivent se placer en position substitutionnelle dans le cristal (ils doivent prendre la place d'un atome de silicium). En effet, les dopants placés en position interstitielle (dans un interstice du réseau) ne conduisent pas à une modification notable des propriétés électriques.

Un semi-conducteur intrinsèque possède des impuretés résiduelles qui peuvent jouer le rôle d'accepteurs ou de donneurs d'électrons. On peut le doper avec des impuretés de types opposés pour compenser l'effet des impuretés résiduelles. Dans ce cas on dit que le semi-conducteur est *compensé*.

### 6.8.1 Semi-conducteur de type *n*

Supposons que nous ayons remplacé, dans un cristal de silicium, un atome de silicium par un atome d'arsenic. Ce dernier possède 5 électrons de valence alors que le silicium n'en possède que 4. Cet électron supplémentaire est sur un niveau d'énergie, situé dans la bande interdite, placé à 54 meV en dessous du minimum,  $E_C$ , de la bande de conduction (figure 6.5). C'est une orbitale localisée au voisinage de l'atome d'arsenic qui n'est pas délocalisée dans tout le cristal comme c'est le cas des bandes d'énergie. Mais, comme ce niveau d'énergie est situé à 54 meV *au-dessous* de la bande de conduction, l'électron de ce niveau passe très vite dans la bande de conduction par excitation thermique. Il participe donc à la conduction dans le cristal. Le dopage est qualifié pour cette raison de *dopage n*. Le dopant, dans cet exemple l'arsenic, se comporte comme un *donneur d'électrons* et le semi-conducteur obtenu est dit de *type n*.

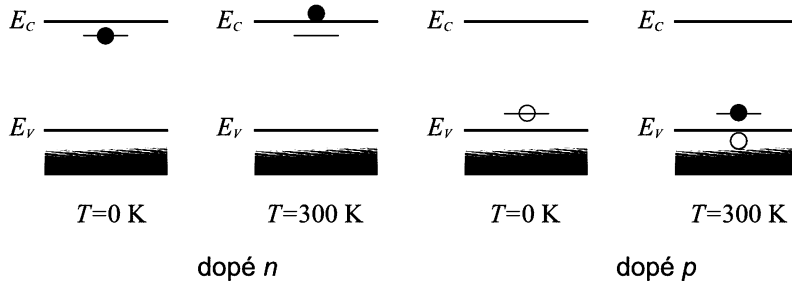
---

mêmes conditions. Pour des concentrations plus grandes, il se forme des précipités qui rendent le semi-conducteur impropre à une utilisation en électronique. Plusieurs méthodes sont possibles pour réaliser ce dopage :

- on peut doper le silicium fondu avant la croissance du cristal.
- l'implantation ionique permet de bien contrôler le dopage. La méthode consiste à bombarder le cristal avec des ions dont l'énergie cinétique est de l'ordre de 15 à 200 keV (éventuellement jusqu'au MeV). Les implanteurs d'ions sont de petits accélérateurs de particules qui permettent de communiquer de l'énergie cinétique aux ions de l'atome dopant. Lors du dopage du cristal, on prend soin d'éliminer l'effet de canalisation en orientant la plaquette de silicium d'un angle de  $7^\circ$  par rapport à la direction incidente du faisceau d'ions. L'étape d'implantation est suivie d'un recuit thermique pour restaurer le réseau cristallin qui s'est amorphisé localement aux points d'implantation.
- on peut faire passer sur la surface du silicium un gaz contenant une impureté dopante comme  $BBr_3$  ou  $POCl_3$ , par exemple. La diffusion du dopant se fait alors dans un four à haute température ( $\approx 800\text{--}1\,000^\circ\text{C}$ ).
- d'autres méthodes particulières peuvent être utilisées comme le bombardement par des neutrons qui permettent de doper du *Si* avec du phosphore selon une réaction nucléaire de transmutation.

L'évolution vers une réduction de taille des composants des circuits intégrés conduit à réaliser des dopages de moins en moins profonds ce qui permet l'utilisation de techniques laser pour le recuit ou le dopage en phase gazeuse assistée par laser.





**Figure 6.5** Structure de bande d'un semi-conducteur dopé  $n$  et dopé  $p$  à  $T = 0 \text{ K}$  et  $T = 300 \text{ K}$ . Un électron est représenté par un cercle plein et un trou par un cercle vide. Le dessin n'est pas à l'échelle.

### 6.8.2 Semi-conducteur de type $p$

Considérons le silicium et dopons le avec des atomes de bore (élément de la colonne III). Comme le bore a un électron de valence de moins que le silicium, il se comporte comme un *accepteur d'électrons*. Une orbitale vide, localisée au voisinage de l'atome de bore se trouve à environ 50 meV *au-dessus* du maximum,  $E_V$ , de la bande de valence (figure 6.5). Compte tenu de la proximité de la bande de valence, un électron de celle-ci va très vite occuper ce niveau d'énergie par excitation thermique. Il en résulte un trou dans la bande de valence qui va contribuer au processus de conduction électrique. La création d'un trou laisse un atome d'accepteur négatif,  $B^-$ , de charge  $-e$ , lié au réseau. Le dopage par des atomes accepteurs d'électrons est dit de *type  $p$* .

### 6.8.3 Niveaux d'énergie des impuretés

Lors du dopage, un atome du réseau est substitué par un atome du dopant, donneur ou accepteur. À la position de substitution, et dans son voisinage, le potentiel électrique devient différent de ce qu'il était avant puisque l'atome est différent. On peut évaluer le niveau d'énergie que cela induit dans le schéma des bandes d'énergie si l'on fait l'hypothèse que la perturbation due à l'impureté est faible et de longue portée, *i.e.* qu'elle s'étend typiquement sur quelques dizaines d'atomes voisins. Avec cette hypothèse, on peut traiter l'atome de dopant par analogie avec l'atome d'hydrogène en supposant que la masse de l'électron est la masse effective au voisinage du bord de la bande d'énergie concernée. Nous allons, avec ces simplifications, traiter les dopants donneurs d'électrons puis ceux qui sont accepteurs.

#### a) Impuretés donneurs d'électrons

Considérons le silicium et une impureté donneur d'électrons pentavalente, le phosphore, par exemple qui appartient à la colonne V de la classification périodique. Si l'atome de phosphore se substitue à un atome de  $Si$ , quatre des électrons de valence

du donneur se comportent pratiquement comme des électrons de valence d'un atome de *Si*. Le cinquième électron voit l'ion de l'impureté,  $P^+$ , qui a une charge positive. Un modèle grossier consiste à dire que nous séparons la contribution de l'impureté pentavalente en deux parties :

- la première est un « quasisilicium », formé d'un noyau de *Si*, des électrons de cœur et de quatre électrons de valence ;
- la deuxième partie est le cinquième électron de valence du phosphore. On le suppose lié au proton supplémentaire qui provient du noyau de phosphore.

Avec cette hypothèse, les quatre électrons du « quasisilicium » contribuent à la construction de la bande de valence du semi-conducteur alors que le cinquième crée un nouveau niveau d'énergie proche de la bande de conduction. Le problème se ramène donc à évaluer les états d'énergie d'un atome d'hydrogène un peu particulier puisque l'électron et le proton ne se trouvent pas dans le vide mais dans le cristal de silicium dont la constante diélectrique est  $\epsilon \neq \epsilon_0$ . S'il n'y avait pas le proton excédentaire, l'électron se placerait dans le bas de la bande de conduction dont l'énergie,  $E_C$ , est la référence du vide. L'existence d'un proton excédentaire crée une énergie de liaison qui diminue l'énergie de l'électron supplémentaire et le fait passer sous la bande de conduction. On peut estimer cette quantité avec le modèle de l'atome d'hydrogène en tenant compte du fait que le milieu a une constante diélectrique  $\epsilon$  et que l'électron a une masse effective  $m_e^*$  calculée au bord de la bande de conduction. Le niveau d'énergie de l'électron, repéré par rapport au bas de la bande de conduction, est donné par le fondamental de notre atome d'hydrogène un peu particulier (cf. MQ, chapitre 9, section 9.1) :

$$E_d = E_C - \left( \frac{1}{4\pi\epsilon} \right)^2 \frac{m_e^* e^4}{2\hbar^2} = E_C - 13,6 \left( \frac{m^*}{m} \right) \left( \frac{\epsilon_0}{\epsilon} \right)^2 \text{ eV} \quad (6.20)$$

Le rayon  $a$  de l'orbite de l'état fondamental de cet atome d'hydrogène un peu particulier peut être exprimé en fonction du rayon de Bohr de l'atome d'hydrogène  $a_0$  par :

$$a = a_0 (\epsilon/\epsilon_0) (m^*/m) = 0,53 (\epsilon/\epsilon_0) (m^*/m) .$$

Pour la plupart des semi-conducteurs, le niveau donneur est situé de quelques unités à quelques dizaines de meV au-dessous du niveau le plus bas de la bande de conduction. Le rayon de Bohr peut atteindre une centaine d'Å. L'énergie du niveau donneur ne dépend que des propriétés du cristal (constante diélectrique et masse effective des électrons en bord de bande de conduction). On trouverait ainsi 25 meV pour le silicium, 6 meV pour le germanium et 7 meV pour l'*AsGa*. On peut constater, dans le tableau 6.1, que les ordres de grandeur sont respectés mais que ce modèle très simple ne reproduit pas les variations que l'on observe d'un dopant à l'autre.

**Tableau 6.1** Niveau d'énergie des impuretés donneurs et accepteurs. Le niveau donneur est situé à  $E_d$  au-dessous du bas de la bande de conduction et le niveau accepteur à  $E_a$  au-dessus du haut de la bande de valence.

Semi-conducteur	Donneur	$E_d$ (meV)	Accepteur	$E_a$ (meV)
AsGa	Si	5,8	Si	35
AsGa	Ge	6,0	Be	28
Si	As	54	B	45
Si	P	45	Ga	72
Ge	As	13	B	10
Ge	P	12	Ga	11

### b) Impuretés accepteurs d'électrons

Voyons maintenant le cas où le dopant est accepteur d'électrons par rapport aux atomes du cristal semi-conducteur. C'est, par exemple, le cas du bore ou de l'aluminium pour le silicium. Nous allons considérer le silicium et supposer qu'une impureté trivalente d'aluminium se substitue à un atome de silicium dans le réseau. L'aluminium se trouve sur la même ligne de la classification périodique que le silicium mais dans la colonne III. Cette impureté a un électron de moins que le silicium et son noyau contient aussi un proton en moins. Avec le même raisonnement que ci-dessus, nous allons considérer que la contribution de cet atome trivalent peut être décomposée en deux parties :

- la première est un « quasisilicium », donc un noyau de *Si*, les électrons du cœur et quatre électrons de valence. Pour obtenir ce cœur neutre, il a fallu ajouter un proton et un électron à l'atome d'aluminium ;
- la deuxième est un ensemble constitué d'une charge négative correspondant au proton perdu associée à un trou positif.

Ce modèle est bien sûr très approximatif. Ceci provient de ce que le traitement de la bande de valence, qui est pleine, est beaucoup plus complexe que celui de la bande de conduction qui est vide. Le niveau d'énergie de l'accepteur peut être évalué en utilisant le modèle de l'atome d'hydrogène mais avec un noyau négatif et un « électron » positif. Les niveaux d'énergie sont donnés par :

$$E_a = E_V + \left( \frac{1}{4\pi\epsilon} \right)^2 \frac{e^4 m_h^*}{2\hbar^2} = E_V + 13,6 \left( \frac{m_h^*}{m} \right) \left( \frac{\epsilon_0}{\epsilon} \right)^2 \text{ eV} \quad (6.21)$$

où  $m_h^*$  est la masse effective du trou évaluée au bord de la bande de valence. Un accord raisonnable avec l'expérience est obtenu en prenant pour  $m_h^*$  la masse effective des trous massifs. Ce niveau d'énergie est repéré par rapport au haut de la bande de valence puisque, si le trou ajouté n'était pas lié, il se trouverait au sommet de la bande de valence.

### 6.8.4 Dopants amphotères et autodopage

Pour le silicium, par exemple, un dopant peut être accepteur ou donneur d'électrons mais pas les deux. Ce n'est pas le cas des composés III–V pour lesquels un même atome peut se comporter comme un donneur ou un accepteur selon sa position de substitution dans le cristal. Prenons le cas de l'*AsGa*, par exemple, avec le silicium comme dopant. Si l'atome de *Si* remplace un atome d'*As*, il se comporte comme un accepteur alors que s'il remplace un atome de *Ga* il se comporte comme une impureté donneur d'électrons. On le désigne pour cette raison sous le nom de *dopant amphotère*.

Pour certains semi-conducteurs composés de plusieurs types d'atomes, il peut y avoir *autodopage*. C'est le cas par exemple du composé *HgCdTe* pour lequel la substitution de sites occupés par des atomes de *Hg* ou de *Cd* par des atomes de *Te* peut conduire à des niveaux donneurs.

### 6.8.5 Niveaux profonds

Les éléments dopants que nous avons cités dans le cas du silicium conduisent à des niveaux d'énergie, situés dans la bande interdite, qui sont soit très proches de la bande de conduction pour un dopage *n*, soit très proches de la bande de valence pour un dopage de type *p*. Ils permettent d'enrichir le semi-conducteur en électrons (dopage *n*) ou en trous (dopage *p*). Il est également possible d'utiliser d'autres dopants que ceux cités plus haut, par exemple *Cu*, *Au*, *Ag*, *Fe*. . . Ils vont également conduire à la création d'un, ou parfois de deux, niveaux dans la bande interdite mais ceux-ci seront situés dans le milieu de celle-ci. On les appelle pour cette raison des *niveaux profonds*. Étant loin des bandes de conduction et de valence, ils ne vont pratiquement pas contribuer au phénomène de conduction électrique car l'énergie thermique n'est pas suffisante pour effectuer des transitions efficaces de ce niveau vers la bande de conduction, ou de la bande de valence vers ce niveau d'énergie. Par contre, leur présence va dégrader de manière appréciable les propriétés électriques du semi-conducteur en jouant le rôle de centres de recombinaison.

Les niveaux profonds peuvent se situer n'importe où dans la bande interdite et sont caractérisés par le fait qu'ils modifient localement la partie à courte portée du potentiel atomique puisque l'atome de substitution est très différent des autres atomes du cristal. La fonction d'onde associée à ces impuretés est très localisée dans l'espace alors que celle associée aux *niveaux peu profonds*, proches de la bande de conduction ou de la bande de valence, peut s'étendre sur plusieurs atomes voisins (le rayon de Bohr peut atteindre la centaine d'Å). Des niveaux profonds peuvent également apparaître dans la bande interdite par suite de défauts dans le cristal, vacances ou dislocations, par exemple.

### 6.8.6 Dopage fort

Lorsque la concentration des dopants devient importante, typiquement supérieure à  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , l'électron d'une impureté particulière peut être influencé par le potentiel créé par une impureté voisine (si deux impuretés sont situées à une distance inférieure à deux fois le rayon de Bohr introduit plus haut, *i.e.* typiquement  $100 \text{ Å}$ ). La régularité de la présence d'impuretés peut induire des bandes d'énergie dans la bande interdite. La structure de bande du cristal hôte peut s'en trouver fortement perturbée et on observe une modification de la largeur de la bande interdite. C'est le cas pour le silicium dont le gap diminue pour des forts dopages.

## 6.9 SEMI-CONDUCTEURS EXTRINSÈQUES

Les dopants de type  $n$  introduisent des niveaux d'énergie proches de la bande de conduction. Par conséquent, les électrons supplémentaires ainsi apportés passent pratiquement tous, à la température ordinaire, dans la bande de conduction. Pour les dopants de type  $p$ , il se forme aussi pratiquement autant de trous dans la bande de valence qu'il y a d'accepteurs supplémentaires.

Le but du dopage est d'augmenter soit le nombre d'électrons dans la bande de conduction, soit le nombre de trous dans la bande de valence. Ceci n'est réalisé que si les électrons situés sur les niveaux des dopants donneurs passent dans la bande de valence, ou si les niveaux des impuretés accepteurs, situés juste au-dessus de la bande de valence, accueillent des électrons de cette dernière. Ceci n'a pas lieu au zéro absolu, ou à très basse température. Il faut une température suffisante pour que ce soit le cas.

Les porteurs de charge (électrons ou trous) provenant des dopants sont en général plus nombreux que ceux provenant du semi-conducteur lui-même. Dans un semi-conducteur, le transport de charges se fait à la fois par les électrons et par les trous. Dans un semi-conducteur intrinsèque, ces deux porteurs de charges sont en nombre égaux. Dans un semi-conducteur dopé, il y a un fort excédent d'électrons par rapport aux trous (dans le cas d'un semi-conducteur de type  $n$ ) ou l'inverse (pour un semi-conducteur de type  $p$ ). On appelle *porteurs majoritaires*, par opposition aux *porteurs minoritaires*, les porteurs de charges qui sont en plus grand nombre.

Pour un semi-conducteur de type  $n$ , appelons  $N_d$  le nombre d'atomes donneurs. Les électrons dans la bande de conduction ont deux origines :

- les électrons provenant de la bande de valence, qui sont en nombre égal au nombre de trous  $n_h$ , puisqu'un électron passant de la bande de valence à la bande de conduction crée un trou dans la bande de valence.
- les  $N_d$  électrons provenant du donneur.

Par conséquent  $n_e = n_h + N_d$ . Mais, puisque  $N_d \gg n_h$ , on a  $n_e \simeq N_d$ . Comme (équation 6.17)  $n_e n_h = n_i^2$  (loi d'action de masse où  $n_i^2$  est la constante),  $n_h = n_i^2 / N_d$ . D'où, en résumé :

$$n_e = N_d \quad \text{et} \quad n_h = n_i^2 / N_d \quad (6.22)$$

Un raisonnement analogue pour un semi-conducteur de type  $p$  conduit à la relation  $n_h = n_e + N_a \simeq N_a$ , ou :

$$n_h = N_a \quad \text{et} \quad n_e = n_i^2 / N_a \quad (6.23)$$

On peut ainsi calculer le niveau de Fermi d'un semi-conducteur extrinsèque : il est différent de celui du semi-conducteur intrinsèque. Nous le noterons  $E_F^{(i)}$  pour le distinguer.

Pour un semi-conducteur de type  $n$ , l'expression (6.12) est très générale et aucune hypothèse n'a été faite sur la nature du semi-conducteur. Elle exprime seulement la notion d'équilibre statistique. En utilisant (6.12) et (6.22), nous avons :

$$n_e = N_d = N_e \exp \left[ - \left( E_c - E_F^{(n)} \right) / k_B T \right],$$

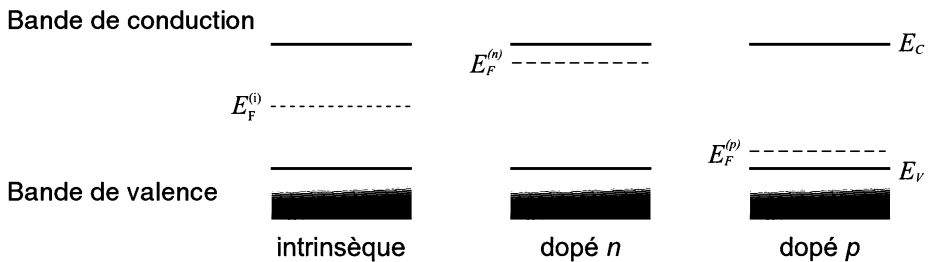
où  $E_F^{(n)}$  est l'énergie de Fermi du semi-conducteur  $n$ . On en déduit que  $E_c - E_F^{(n)} = k_B T \text{Log}(N_e / N_d)$ . Pour un semi-conducteur intrinsèque nous avons

$$n_i = N_e \exp \left[ - \left( E_c - E_F^{(i)} \right) / k_B T \right],$$

où  $E_F^{(i)}$  est le niveau de Fermi du semi-conducteur intrinsèque. Par conséquent :

$$E_F^{(n)} - E_F^{(i)} = -k_B T \left[ \text{Log} \left( \frac{N_e}{N_d} \right) + \text{Log} \left( \frac{n_i}{N_e} \right) \right] = k_B T \text{Log} \left( \frac{N_d}{n_i} \right) \quad (6.24)$$

Comme  $N_d \gg n_i$ , cette différence est positive et  $E_F^{(n)}$  est au-dessus de  $E_F^{(i)}$ . Le niveau de Fermi s'est rapproché de la bande de conduction (figure 6.6). Ce résultat était prévisible puisqu'en dopant le cristal on ajoute des particules au-dessus du niveau de Fermi du semi-conducteur intrinsèque.



**Figure 6.6** Position du niveau de Fermi selon la nature du semi-conducteur.

En suivant la même démarche pour un semi-conducteur de type  $p$ , on peut montrer que le niveau de Fermi d'un semi-conducteur dopé  $p$  est au-dessous de celui d'un semi-conducteur intrinsèque (figure 6.6). En effet, en utilisant (6.13), on obtient :

$$E_F^{(p)} - E_F^{(i)} = -k_B T \text{Log} \left( \frac{N_a}{n_i} \right) \quad (6.25)$$

## EXERCICES

---

### Exercice 6.1

Calculer la valeur des niveaux donneurs et accepteurs pour l'AsGa dans le cadre du modèle simple développé dans la section 6.8.3. On donne  $\epsilon = 13,2\epsilon_0$ ,  $m_e^* = 0,067m$  et  $m_h^* = 0,45m$ . Calculer le rayon de l'orbite de Bohr de l'électron supplémentaire apporté par l'atome donneur.

---

### Exercice 6.2

1. Calculer la densité d'état d'un gaz d'électrons libres pour une énergie  $E = 1$  eV.
2. Même question si le gaz d'électrons est à 2 dimensions.
3. Calculer la densité d'états, pour  $E = 1$  eV, du silicium dans l'une de ses six vallées sachant que  $m_\ell^* = 0,98m$  et  $m_t^* = 0,19m$ , où  $m$  est la masse de l'électron libre. En déduire la densité d'état pour les six vallées du silicium.

---

### Exercice 6.3

1. Évaluer la densité de porteurs de charge dans du silicium intrinsèque à 300 K. On donne  $E_g = 1,12$  eV,  $m_\ell^* = 0,98m$ ,  $m_t^* = 0,19m$ ,  $m_{lh}^* = 0,16m$ ,  $m_{hh}^* = 0,49m$ . On a en fait  $n_i = 1,45 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  à 300 K.
2. Calculer la concentration de porteurs de charge à  $T = 300$  K dans du silicium dopé avec  $10^{16}$  atomes d'arsenic par  $\text{cm}^3$  si  $n_i = 1,45 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ .
3. Calculer la valeur du niveau de Fermi par rapport au niveau de Fermi du silicium intrinsèque.

---

### Exercice 6.4

La maille du cristal de silicium vaut  $a = 5,43 \text{ \AA}$ . Les masses effectives longitudinale et transversale valent  $m_\ell^* = 0,98m$  et  $m_t^* = 0,19m$ , où  $m$  est la masse de l'électron libre. Sachant que le minimum de la bande de conduction se trouve dans la vallée [100] avec  $k = \frac{2\pi}{a} [(0,85), 0, 0]$ , calculer, par rapport à ce minimum, l'énergie d'un électron, situé dans la bande de conduction, qui se trouve dans la vallée [100] et qui a comme vecteur d'onde  $k = \frac{2\pi}{a} [(0,95), (0,1), 0]$ .

## CORRIGÉS

### Exercice 6.1

En utilisant les résultats de la section 6.8, on obtient :

$E_d = 5,5 \text{ meV}$  au-dessous du bas de la bande de conduction et  $E_a = 36 \text{ meV}$  au-dessus du haut de la bande de valence.

Le rayon de Bohr de l'atome d'hydrogène est égal à  $0,53 \text{ \AA}$ , par conséquent :

$$a = 0,53 \left( \frac{\epsilon}{\epsilon_0} \right) \left( \frac{m}{m^*} \right) = 104,4 \text{ \AA}$$

### Exercice 6.2

En utilisant les résultats de la section 6.5, on trouve :

1.  $\rho(E) = 1,07 \times 10^{56} \sqrt{E} \text{ J}^{-1} \text{ m}^{-3} = 6,8 \times 10^{21} \sqrt{E} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-3}$ . Pour  $E = 1 \text{ eV}$ ,  $\rho(E) = 6,8 \times 10^{21} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-3}$

2. A deux dimensions, la densité d'état est indépendante de l'énergie. On trouve  $\rho(E) = \text{J}^{-1} \text{ m}^{-2} = 4,21 \times 10^{14} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ .

Il y a donc une très grande différence selon la dimensionnalité du système.

3. La masse effective des électrons vaut  $m_e^* = (m_\ell^* m_t^{*2})^{1/3} = 0,33m$ . En utilisant le résultat de la question 1, on a  $\rho(E) = 6,8 \times 10^{21} \left( \frac{m_e^*}{m} \right)^{3/2} \sqrt{E} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-3} = 1,28 \times 10^{21} \sqrt{E} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-3}$ . Pour les 6 vallées, ce résultat est multiplié par 6 :

$$\rho(E) = 7,67 \times 10^{21} \left( \frac{m_e^*}{m} \right)^{3/2} \sqrt{E} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-3}$$

### Exercice 6.3

1. La masse effective équivalente des électrons et des trous peut être évaluée en utilisant les indications de la section 6.6. On a  $m_e^* = (6)^{2/3} (m_\ell^* m_t^{*2})^{1/3} = 1,085m$  pour tenir compte des 6 vallées et  $m_h = (m_{lh}^{*3/2} + m_{hh}^{*3/2})^{2/3} = 0,55m$  pour les trous. En utilisant l'équation 6.19, on trouve :

$$n_i = 2,5 \left( \frac{m_e^*}{m} \right)^{3/4} \left( \frac{m_h^*}{m} \right)^{3/4} \left( \frac{T}{300 \text{ K}} \right)^{3/2} \exp(-E_g/2k_B T) \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$$

Comme  $k_B T = 0,026 \text{ eV}$ , on a, en utilisant les masses effectives obtenues ci-dessus,  $n_i = 7,5 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$ . On retrouve le bon ordre de grandeur mais il faut



dire qu'une faible variation de l'argument de l'exponentielle conduit à une grande variation de  $n_i$ .

2. A 300 K toutes les impuretés dopantes sont pratiquement ionisées. Par conséquent le nombre d'électrons est  $n_e = N_d = 10^{16}$ . La loi d'action de masse,  $n_e n_h = n_i^2$  permet de calculer la concentration des trous :

$$n_h = \frac{n_i^2}{n_e} = \frac{n_i^2}{N_d} = \frac{(1,45 \times 10^{10})^2}{10^{16}} = 2,1 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$$

Le niveau de Fermi, mesuré à partir du niveau de Fermi du système intrinsèque est donné par :

$$E_F^{(n)} - E_F^{(i)} = k_B T \ln \left( \frac{n_e}{n_i} \right) = 0,35 \text{ eV}$$

Il est situé à 0,21 eV au-dessous de  $E_C$ , le minimum de la bande de conduction.

### Exercice 6.4

On a, par rapport au minimum de la bande de conduction,  $\Delta k = [(0, 1), (0, 1), 0]$ . Par conséquent, les composantes du nombre d'onde par rapport à celles du minimum de la bande de conduction sont  $k_\ell = k_t = \frac{2\pi}{a} \times 0,1 = 1,157 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$ . L'énergie de l'électron par rapport au minimum de la bande de conduction vaut

$$E = \frac{\hbar^2 k_\ell^2}{2m_\ell^*} + \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_t^*}. \text{ On trouve } E = 5,1 \times 10^{-20} \text{ J} = 0,32 \text{ eV}.$$

## Chapitre 7

---

# Dynamique des électrons

Les matériaux peuvent avoir des conductivités électriques très différentes. Elle est très grande pour les métaux, très faible pour les isolants. Elle varie sur environ 25 ordres de grandeur ce qui en fait l'une des quantités physiques qui a la plus grande dynamique de variation.

Les électrons de la bande de conduction, ainsi que les trous de la bande de valence, sont appelés porteurs libres car ils permettent la circulation d'un courant électrique. Ils se déplacent lorsque l'on applique un champ électrique externe au cristal et un courant électrique est créé. La manière dont ils répondent à un champ électrique externe, dépend de l'intensité de ce dernier. S'il est faible, le comportement des porteurs de charge obéit à la loi d'Ohm. Pour des champs électriques appliqués plus importants, la loi d'Ohm n'est plus satisfaite.

Dans une approche classique, un électron se propage, sous l'action du champ électrique constant, de manière rectiligne. Cette propagation est interrompue par suite des collisions de l'électron avec des impuretés ou des atomes du cristal. On s'attend à ce que la conductivité (la résistance) diminue (augmente) avec le nombre d'imperfections du réseau et que la résistivité augmente avec la température car les vibrations des atomes du réseau et la probabilité de collision des électrons avec des phonons augmente.

Dans l'approche quantique on regarde plutôt l'électron comme une onde qui se propage dans le réseau et qui diffuse sur les atomes et les imperfections du réseau. Pour un cristal parfait, sans défaut, la diffusion des ondes associées aux électrons se fait en phase et vers l'avant. Il y a une interférence constructive de toutes les ondes diffusées et l'on dit qu'il y a *diffusion cohérente*. Lorsqu'il y a des impuretés, la diffusion des ondes n'est plus en phase et ne se fait plus préférentiellement vers l'avant ; il y a *diffusion incohérente*.

## 7.1 DÉRIVE DANS UN CHAMP ÉLECTRIQUE

Pour étudier la réponse d'un porteur de charge à un champ électrique appliqué, considérons en premier lieu un gaz d'électrons libres avant d'aborder, de manière simplifiée, le cas des électrons dans un cristal.

### 7.1.1 Électrons libres

Dans le modèle très simple où les électrons de valence sont supposés libres, c'est à dire sans interaction entre-eux et sans interaction avec les ions du cristal, chaque électron est décrit par un paquet d'onde. Nous le supposons suffisamment localisé dans l'espace pour pouvoir traiter l'électron comme une particule. La vitesse de groupe d'un électron est définie par :

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \quad \text{soit, comme } E = \hbar \omega, \quad v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \quad (7.1)$$

En l'absence de champ électrique appliqué, *i.e.* de différence de potentiel, il n'y a pas de courant électrique. Appliquons, à l'instant  $t = 0$ , un champ électrique constant  $\vec{E}$ . Considérons un électron d'énergie  $E$  et de module de vecteur d'onde  $k$  au temps  $t = 0$ . Au temps infinitésimal  $dt$ , l'énergie de l'électron est devenue  $E + dE$  et le module de son vecteur d'onde a augmenté de  $dk$ . Le travail  $\delta\omega$  effectué sur l'électron par le champ électrique est égal au produit de la force par le déplacement. Comme  $\vec{E}$  et  $\mathbf{v}_g$  sont colinéaires,  $\delta\omega = (-eE) \times (v_g dt)$ . Par ailleurs, cette variation d'énergie est égale à la variation d'énergie cinétique  $dE$  de l'électron soit, en utilisant (7.1),  $\hbar v_g dk$ . On déduit de ces deux expressions :

$$\hbar \frac{dk}{dt} = -eE \quad \text{ou, vectoriellement : } \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e \vec{E} \quad (7.2)$$

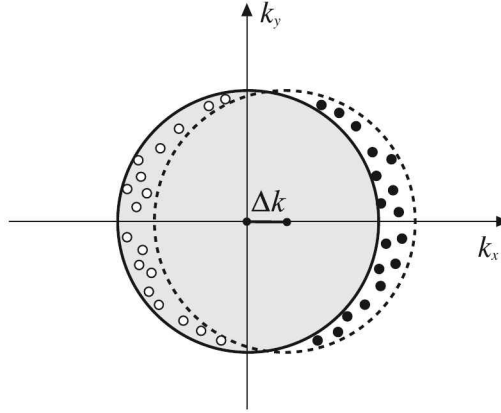
Pour un gaz d'électrons libres, la relation de dispersion s'écrit :

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \implies v_g = \frac{\hbar k}{m} \implies m \frac{dv_g}{dt} = -eE \quad (7.3)$$

et on retrouve l'équation classique du principe de la dynamique.

Appliquer un champ électrique constant pendant un temps  $\Delta t$  au gaz d'électrons libres revient, dans l'espace des  $\mathbf{k}$ , à déplacer la sphère de Fermi d'une quantité  $\Delta k = (-eE/\hbar) \Delta t$  (*cf.* figure 7.1). Cela signifie, par rapport à la sphère de Fermi d'origine, qu'il y a création d'excitations particules-trous. Ces excitations sont des électrons, symbolisés par des petits cercles pleins dans la figure 7.1, et des trous, symbolisés par des cercles vides. La quantité  $\Delta k$  augmente proportionnellement à  $\Delta t$ .

En réalité, lorsque l'on applique un champ électrique constant, le courant électrique est constant. Ce n'est pas ce que l'on obtient avec le modèle que nous venons de décrire



**Figure 7.1** Déplacement de la sphère de Fermi dans l'espace des  $\mathbf{k}$  sous l'effet du champ électrique. Ce déplacement a été exagéré car il est réalité beaucoup plus faible. La sphère de Fermi initiale est grisée et sa surface est tracée en traits pleins alors que celle de la sphère de Fermi déplacée est tracée en pointillés. Les électrons excités, i.e. sortant de la sphère de Fermi initiale, sont symbolisés par des cercles pleins et les trous formés dans la sphère de Fermi initiale par des cercles vides.

où  $k$  augmente indéfiniment. De plus, si l'on cesse d'appliquer le champ électrique  $\vec{E}$ , on sait que le courant ne circule plus au bout d'un temps très court alors qu'il reste constant avec nos hypothèses.

La raison pour laquelle  $k$  ne croît pas indéfiniment provient de l'existence d'impuretés dans le cristal avec lesquelles les électrons entrent en collision. Ces processus très complexes peuvent être modélisés par un processus de relaxation vers un équilibre, qui est le régime permanent, avec un *temps de relaxation* égal à  $\tau$  :

$$\Delta k \propto \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \implies \frac{d}{dt}(\Delta k) = -\frac{1}{\tau}\Delta k \quad (7.4)$$

Nous avons utilisé la notation  $\Delta k$  qui est l'écart de  $k$  par rapport à sa valeur initiale. Cette relaxation dans l'espace des  $\mathbf{k}$  se traduit par une force de rappel vers la configuration d'équilibre qui vaut  $\mathbf{F}_{\text{rappel}} = \hbar (\Delta \mathbf{k}) / \tau = m (\Delta \mathbf{v}_g) / \tau$ . Cette hypothèse modifie l'équation (7.2) de la manière suivante :

$$\hbar \frac{d}{dt}(\Delta \mathbf{k}) = -e \vec{E} - \frac{\hbar}{\tau}(\Delta \mathbf{k}) \text{ ou } m \frac{d}{dt}(\Delta \mathbf{v}_g) = -e \vec{E} - \frac{m}{\tau}(\Delta \mathbf{v}_g) \quad (7.5)$$

En régime stationnaire, les dérivées temporelles sont nulles et l'équation (7.5) montre que le centre de la sphère de Fermi est déplacé de  $(\Delta \mathbf{k})_{\text{eq}} = -e \vec{E} \tau / \hbar$  par rapport à l'origine. La vitesse d'entraînement des électrons  $(\Delta \mathbf{v}_g)_{\text{eq}} = -e \vec{E} \tau / m$  est la vitesse moyenne d'un électron repérée par rapport à la vitesse initiale. C'est la *vitesse de*

dérive de l'électron telle qu'elle est définie dans un processus de transport. Nous poserons par la suite  $\mathbf{v}_e = (\Delta \mathbf{v}_g)_{\text{eq}}$ . S'il y a  $n_e$  électrons par unité de volume, la densité de courant électrique  $\mathbf{j}$  vaut  $\mathbf{j}_e = -n_e e \mathbf{v}_e = n_e e^2 \tau \vec{\mathbf{E}}/m$  qui est en fait la loi d'Ohm :

$$\mathbf{j}_e = \sigma_e \vec{\mathbf{E}} \quad (7.6)$$

où  $\sigma$ , la conductivité électrique, vaut  $\sigma_e = n_e e^2 \tau / m$ . La *mobilité* des électrons,  $\mu_e$ , i.e. leur facilité à se mouvoir, est égale au module de la vitesse de dérive par unité de champ électrique appliqué :

$$\mu_e = \frac{|\mathbf{v}_e|}{E} = \frac{v_e}{E} = \frac{e \tau}{m} \quad (7.7)$$

C'est un nombre positif et l'on a  $\mathbf{v}_e = -\mu_e \vec{\mathbf{E}}$  puisque la vitesse de dérive d'un électron se fait dans le sens opposé du champ électrique. Avec ces relations, on obtient pour la loi d'Ohm :

$$\mathbf{j}_e = n_e (-e) \left( -\mu_e \vec{\mathbf{E}} \right) = e \mu_e n_e \vec{\mathbf{E}} \quad (7.8)$$

### 7.1.2 Électrons et trous dans un cristal

Nous allons maintenant considérer l'influence du réseau cristallin sur le gaz d'électrons en supposant que le champ électrique appliqué est assez faible ( $\lesssim 1$  kV/cm). La prise en compte du réseau cristallin conduit à l'apparition de bandes permises et interdites. La relation de dispersion  $E = E(k)$  devient plus complexe que celle des électrons libres  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ . La fonction d'onde de l'électron obéit au théorème de Bloch et, si le cristal est parfait, les électrons se propagent sans collision.

Appliquons un champ électrique constant  $\vec{\mathbf{E}}$  au cristal. En l'absence de collisions, le raisonnement développé dans la section 7.1.1 est toujours valable et la surface de Fermi se déplace d'une quantité  $\Delta \mathbf{k}$  proportionnelle au temps. La différence réside dans le fait que la surface de Fermi est une surface plus complexe résultant de l'interaction entre le réseau et le gaz d'électrons.

Les électrons ne se propagent pas sans collision et ceci se traduit par un processus de relaxation analogue à celui décrit dans la section 7.1.1. Dans un semi-conducteur, les collisions peuvent avoir diverses origines parmi lesquelles, la présence d'impuretés ionisées provenant du dopage, les phonons, les impuretés chimiques présentes dans le matériau, les rugosités d'interface dans le cas d'hétérostructures, les fluctuations de potentiels aléatoires dans les alliages semi-conducteurs, etc..

Les sources de collision les plus importantes sont dues aux impuretés ionisées provenant du dopage et aux phonons. Dans ce dernier cas, il faut noter que les vibrations du réseau induisent des oscillations du bas de la bande conduction et du haut de la bande de valence. Ce phénomène augmente la probabilité de collision des électrons. Pour fixer les idées, le temps entre deux collisions dans un semi-conducteur est de

l'ordre de  $10^{-13}$  à  $10^{-12}$  s. Ceci conduit à des libres parcours moyens de l'ordre de 100 à 1 000 Å.

Le raisonnement que nous avons tenu dans la section précédente reste valable à condition de remplacer la masse de l'électron libre par sa masse effective. Celle-ci tient compte de l'interaction entre les électrons et le réseau cristallin. On obtient ainsi :

$$\mathbf{j}_e = -n_e e \mathbf{v}_e = \frac{n_e e^2 \tau}{m_e^*} \vec{E}, \quad \sigma_e = \frac{n_e e^2 \tau}{m_e^*}, \quad \mu_e = \frac{e \tau}{m_e^*} \quad \text{et} \quad \mathbf{j}_e = e n_e \mu_e \vec{E} \quad (7.9)$$

La mobilité  $\mu_e$  a une dépendance explicite en  $1/m^*$ . À travers ce terme, elle dépend donc de la température. Par ailleurs, le temps de relaxation  $\tau$  décroît aussi avec la masse effective. La mobilité dépend donc fortement de cette dernière. Elle est d'autant plus grande que le cristal est plus pur et que la masse effective des porteurs est faible. La mobilité des électrons et des trous de quelques semi-conducteurs sont indiquées dans le tableau 7.1

**Tableau 7.1** Le gap (en eV), la mobilité des électrons,  $\mu_e$  (en  $\text{cm}^2/\text{V/s}$ ), et celle des trous,  $\mu_h$ , sont indiqués pour quelques semi-conducteurs courants. La notation de type (III-V), située après le nom du semi-conducteur, indique que l'un des éléments appartient à la colonne III de la classification périodique et l'autre à la colonne V. Ces données sont tirées de l'ouvrage de J.Singh cité en référence.

Semi-conducteur	Gap (eV à 300 K)	$\mu_e$ ( $\text{cm}^2/\text{V/s}$ )	$\mu_h$ ( $\text{cm}^2/\text{V/s}$ )
Si	1,12	1 500	450
Ge	0,66	3 900	1 900
SiC (IV-IV)	3	400	50
AsGa	1,42	8 500	400
GaP (II-V)	2,26	110	75
AsIn (III-V)	0,36	33 000	460
CdTe (II-VI)	1,56	1 050	100
PbTe (IV-VI)	0,31	6 000	4 000

Les trous se traitent de manière analogue, en utilisant la masse effective  $m_h$  et la charge  $+e$ . Ceci conduit aux expressions suivantes :

$$\mathbf{j}_h = n_h e \mathbf{v}_h = \frac{n_h e^2 \tau}{m_h^*} \vec{E}, \quad \sigma_h = \frac{n_h e^2 \tau}{m_h^*}, \quad \mu_h = \frac{e \tau}{m_h^*} \quad \text{et} \quad \mathbf{j}_h = e n_h \mu_h \vec{E} \quad (7.10)$$

## 7.2 RÉPONSE À UN CHAMP ÉLECTRIQUE

En l'absence de champ électrique extérieur  $\vec{E}$ , les électrons vont dans toutes les directions. Leur distribution d'équilibre est celle de Fermi-Dirac et les niveaux d'énergie sont donnés par la théorie des bandes. Un champ électrique  $\vec{E}$ , appliqué au semi-conducteur, rompt cette symétrie ; les électrons sont soumis à la force  $-e \vec{E}$ , opposée

au champ électrique. Dans le cas général, la résolution du problème du transport des électrons est complexe et nécessite d'avoir recours à l'équation de Boltzmann.

### 7.2.1 Champ électrique faible

Cela correspond à des valeurs de champ électrique  $\lesssim 1$  kV/cm. Le processus de transport peut être décrit comme un phénomène de diffusion avec une vitesse de dérive  $v_d$ . La conductivité électrique et la mobilité des électrons sont reliées au temps de relaxation  $\tau$ . La mobilité des porteurs dans le silicium (table 7.1) est relativement faible comparée à celle d'un semi-conducteur à gap direct, comme l'*AsGa*, et dépend fortement de la température.

Pour le silicium intrinsèque, ou très faiblement dopé (nombre de donneurs  $\lesssim 10^{12}/\text{cm}^3$ ), la mobilité des électrons augmente, lorsque la température du cristal diminue, car la probabilité de collision entre les électrons et le réseau diminue (moins de phonons). Ce comportement est différent lorsque le semi-conducteur est fortement dopé ( $\gtrsim 10^{17}/\text{cm}^3$ ). Dans ce cas, la mobilité augmente légèrement, passe par un maximum, puis décroît par suite de la diffusion des électrons sur les atomes des donneurs.

Contrairement au silicium, la mobilité des électrons de l'*AsGa* (table 7.1) est très grande, même lorsque le champ électrique appliqué est faible. Ceci explique l'intérêt de ce matériau dans les dispositifs hautes fréquences.

### 7.2.2 Champ électrique fort

Pour des champs électriques situés dans l'intervalle  $\approx 1\text{--}100$  kV/cm, les électrons deviennent « chauds » au sens où leur température, définie à partir de leur énergie moyenne, est supérieure à celle du cristal hôte. La vitesse de dérive devient élevée et les approximations utilisées en champ faible ne sont plus valables. La structure des bandes d'énergie prend une grande importance dans le traitement et il faut aller au delà du simple modèle de diffusion.

Pour le silicium, la vitesse de dérive augmente régulièrement lorsque le champ électrique appliqué augmente. Elle sature autour de  $10^7$  cm/s lorsque le champ électrique appliqué est de l'ordre de 100 kV/cm. En effet, si le champ électrique est faible, les électrons ont une masse effective importante. Ils restent confinés dans les six vallées définies dans la section 6.4.2. Lorsque le champ électrique est fort, ils sont excités vers des états d'énergie plus élevée dans une région où la densité d'état est plus importante. Cette croissance régulière de la vitesse de dérive suivie par une saturation est typique des semi-conducteurs à gap indirect pour lesquels il y a des vallées dans lesquelles la masse effective des électrons est grande. Le germanium, qui est un semi-conducteur à 4 vallées en est un autre exemple.

Pour l'*AsGa*, il n'y a qu'un minimum pour la bande de conduction et donc une seule vallée (dite vallée  $\Gamma$ ), dans laquelle la masse effective des électrons est très petite ( $\simeq 0,067 m$ ). Dans une deuxième vallée (cf. figure 6.4), dite vallée *L*, située environ 0,3 eV au-dessus, la masse effective des électrons est plus grande ( $\simeq 0,22 m$ ). Lorsque le champ électrique appliqué est faible, typiquement inférieur à 2,5 kV/cm, les électrons ont une petite masse effective et sont donc rapides (leur vitesse peut atteindre environ  $2 \times 10^7$  cm/s pour un champ électrique de l'ordre de 2,5 kV/cm). Lorsque le champ électrique appliqué augmente, certains électrons passent de la vallée  $\Gamma$  à la vallée *L* et leur masse effective augmente fortement ; ils sont donc ralentis. La vitesse de dérive diminue et sature pour une valeur de l'ordre de  $10^7$  cm/s lorsque le champ électrique appliqué est de l'ordre de 100 kV/cm. Par conséquent, on observe une augmentation de la vitesse de dérive avec le champ électrique (jusqu'à environ 2,5 kV/cm) suivi d'une diminution de celle-ci alors que le champ électrique appliqué continue d'augmenter. Ce phénomène se traduit par une résistance différentielle négative du matériau. Une telle résistance est également observée pour d'autres matériaux à gap direct. C'est une propriété intéressante utilisée dans les dispositifs hyperfréquences.

Les trous participent aussi de façon appréciable au transport de charges dans de nombreux dispositifs (transistors CMOS, transistors bipolaires, etc.). Leurs propriétés de transport sont beaucoup plus complexes car elles dépendent de celles de la bande de valence. Pour la plupart des semi-conducteurs, la densité d'états est grande sauf pour le germanium qui constitue une exception. Ceci se traduit, pour la plupart d'entre eux, par des vitesses de dérive notablement plus faibles que pour les électrons. Seul le germanium a une vitesse de dérive des trous du même ordre de grandeur que celle des électrons. Les propriétés de transport des trous dans le silicium sont assez mauvaises.

Beaucoup de composants électroniques fonctionnent dans le régime des champs électriques forts car ceci améliore leurs performances. Pour d'autres, une part significative du transport des électrons se fait aussi dans ce domaine.

### 7.2.3 Phénomènes de claquage

Les champs électriques très élevés, ( $\gtrsim 100$  kV/cm) conduisent à des phénomènes de claquage qui peuvent détruire le semi-conducteur. Il se produit une multiplication des porteurs de charge qui participent au courant électrique qui circule dans le matériau. Cette multiplication peut avoir deux origines : l'*avalanche* et l'*effet Zener*.

#### a) Effet d'avalanche

Dans les phénomènes de transport dont nous avons parlé dans les deux sections précédentes, les porteurs de charge (électrons ou trous) restent dans la même bande d'énergie lors de leur déplacement. Lorsque l'intensité du champ électrique est très élevée, un électron « chaud » de la bande de conduction peut être diffusé par un électron de la bande de valence et faire passer celui-ci dans la bande de conduction.



On obtient alors, dans la voie finale, deux électrons dans la bande de conduction et un trou dans la bande de valence.

Il y a, dans le processus qui vient d'être décrit, multiplication des électrons dans la bande de conduction d'où le terme d'*effet d'avalanche* utilisé pour décrire ce phénomène. En effet, les deux électrons de la bande de conduction peuvent à leur tour donner chacun deux électrons après collision avec un électron de la bande de valence et ainsi de suite. Ce phénomène se traduit par une augmentation exponentielle du courant traversant le semi-conducteur. Celui-ci peut détruire le composant. Toutefois, cet effet est utilisé dans certains dispositifs particuliers comme par exemple les photodétecteurs à avalanche et dans certains dispositifs haute fréquence.

Un processus analogue peut être observé avec un trou « chaud » qui peut exciter un électron de la bande de valence vers la bande de conduction.

### b) Effet Zener

Citons enfin l'effet Zener. C'est un phénomène de claquage que l'on peut observer dans une jonction  $pn$  lorsque celle-ci est polarisée en inverse (la jonction  $pn$  sera étudiée dans le chapitre 8, section 8.1). Les bandes de valence et de conduction des semi-conducteurs  $p$  et  $n$  ne sont pas au même niveau et il y a la possibilité, lorsque le champ électrique appliqué est élevé, d'avoir un passage, par effet tunnel, d'électrons de la bande de valence d'un des semi-conducteurs vers la bande de conduction de l'autre. L'effet Zener est donc un effet d'origine quantique.

## 7.3 DIFFUSION DES PORTEURS

Un phénomène de transport est généralement caractérisé par une dérive et une diffusion. Pour des degrés de liberté collectifs (*i.e.* résultant d'un mouvement cohérent d'un grand nombre de particules individuelles) couplés à un thermostat constitué de nombreux degrés de liberté évoluant très rapidement, cela se traduit par l'existence de phénomènes dissipatifs et de fluctuations statistiques. De manière générale, dissipation et fluctuations statistiques ne sont pas deux processus indépendants ; ils sont reliés entre eux par le *théorème de fluctuation-dissipation* dont la *relation d'Einstein* est une traduction particulière (*cf.* PS, chapitre 13).

Un exemple très simple de phénomène de transport est celui d'une goutte de colorant déposée à la surface d'une rivière. La goutte se déplace avec le courant, c'est le phénomène de dérive, mais elle s'élargit aussi progressivement au cours du temps, c'est le phénomène de diffusion. La dérive est due au courant de la rivière. Elle a pour origine la diminution de l'énergie potentielle de gravitation lorsque l'on se déplace vers l'aval ; il en découle une force extérieure qui tend à déplacer les molécules d'eau, ainsi que celles du colorant, vers l'aval. La diffusion résulte du fait que la concentration du colorant n'est pas la même en tout point de la rivière ; le potentiel chimique varie

d'un point à un autre. Pour atteindre l'équilibre, pour lequel le potentiel chimique est le même partout, les molécules de colorant diffusent des zones de fortes concentrations vers les zones de concentrations plus faibles. Dans cet exemple, la rivière, avec ses molécules d'eau, joue le rôle du thermostat pour les molécules de colorant.

Dans la section 7.1 nous nous sommes intéressés au phénomène de dérive des porteurs de charge sous l'influence d'un champ électrique extérieur. Nous allons maintenant étudier les fluctuations associées au phénomène de diffusion qui résultent du fait que le potentiel chimique d'un semi-conducteur, ou d'une association de semi-conducteurs, n'est pas le même en tout point.

### 7.3.1 Diffusion sans dérive

En l'absence de champ extérieur, on peut toujours observer un *phénomène de diffusion* qui peut être décrit par la *loi de Fick*. Celle-ci, introduite à l'origine empiriquement, est une approche phénoménologique de la diffusion. Elle relie, au temps  $t$ , le flux de particules,  $\phi(\mathbf{r}, t)$ , au gradient de la concentration  $n(\mathbf{r}, t)$  par  $\phi(\mathbf{r}, t) = -D \nabla n(\mathbf{r}, t)$ , où  $D$  est le coefficient de diffusion. Pour les semi-conducteurs, on écrit habituellement la loi de Fick en utilisant la densité de courant qui est le produit du flux par la charge élémentaire  $e$  ( $\mathbf{J} = -e\phi$ ). Pour les électrons, cela donne :

$$\mathbf{J}_e(\mathbf{r}, t) = eD_e \nabla n_e(\mathbf{r}, t) \quad (7.11)$$

et pour les trous :

$$\mathbf{J}_h(\mathbf{r}, t) = -eD_h \nabla n_h(\mathbf{r}, t) \quad (7.12)$$

Le second membre des équations ci-dessus tient compte de la différence de signe de la charge des porteurs ( $-e$  pour les électrons et  $+e$  pour les trous). La densité totale de courant,  $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ , est la somme des contributions des trous et des électrons :

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{J}_e(\mathbf{r}, t) + \mathbf{J}_h(\mathbf{r}, t) = eD_e \nabla n_e(\mathbf{r}, t) - eD_h \nabla n_h(\mathbf{r}, t) \quad (7.13)$$

Le courant des électrons circule en sens inverse de celui des trous.

### 7.3.2 Diffusion et dérive

Si un champ électrique extérieur est présent, il y a dérive et diffusion pour chaque type de porteurs de charge<sup>1</sup>. Avec (7.9, 7.10, 7.11 et 7.12), les équations donnant la densité

1. Pour un champ électrique alternatif, il existe un autre type de courant qui s'ajoute aux deux précédents ; il s'agit du courant de déplacement  $\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$ , où  $\mathbf{D}$  est le vecteur déplacement électrique ( $\mathbf{D} = \epsilon \vec{\mathbf{E}}$ ). Ce courant est négligeable pour les semi-conducteurs, sauf dans le domaine des hyperfréquences (domaine approximativement supérieur au GHz.).

de courant des électrons et des trous deviennent :

$$\mathbf{J}_e(\mathbf{r},t) = e\mu_e n_e(\mathbf{r},t) \vec{E} + eD_e \nabla n_e(\mathbf{r},t) \quad (7.14)$$

$$\mathbf{J}_h(\mathbf{r},t) = e\mu_h n_h(\mathbf{r},t) \vec{E} - eD_h \nabla n_h(\mathbf{r},t) \quad (7.15)$$

La densité de courant totale vaut :

$$\mathbf{J}(\mathbf{r},t) = \mathbf{J}_e(\mathbf{r},t) + \mathbf{J}_h(\mathbf{r},t) \quad (7.16)$$

Les électrons ont une dérive opposée à la direction du champ électrique alors qu'elle est dans le même sens pour les trous. La mobilité des électrons ou des trous n'est constante que lorsque l'intensité du champ électrique est faible. Pour les grandes valeurs du champ électrique, elle décroît et le produit  $\mu E$  atteint une valeur constante qui correspond à la saturation de la vitesse de dérive. Le courant de dérive sature et devient indépendant de  $E$ .

### 7.3.3 Relation d'Einstein

Il existe une relation entre la mobilité et le coefficient de diffusion : c'est la *relation d'Einstein*. Celle-ci est obtenue dans le cadre de l'approximation de Boltzmann et n'est donc valable que pour un semi-conducteur non dégénéré.

Examinons d'abord le cas des électrons. Pour cela, partons de la relation (7.14). À l'équilibre, le courant d'électrons est nul, donc :

$$e\mu_e n_e(\mathbf{r}) \vec{E}(\mathbf{r}) + eD_e \nabla n_e(\mathbf{r}) = 0 \quad (7.17)$$

Le potentiel chimique est le même partout et la seule excitation du système provient du potentiel électrique  $V(\mathbf{r})$  dont dérive le champ appliqué  $\vec{E}(\mathbf{r})$ . L'énergie potentielle de l'électron dans  $V(\mathbf{r})$  vaut  $-eV(\mathbf{r})$ . L'approximation de Boltzmann, valable pour un système non dégénéré signifie que la distribution  $n_e(\mathbf{r})$  est proportionnelle à  $\exp(eV(\mathbf{r})/k_B T)$ . On déduit de cette hypothèse que :

$$\nabla n_e(\mathbf{r}) = (e/k_B T) \nabla V(\mathbf{r}) n_e(\mathbf{r}).$$

Ce qui donne, en reportant cette expression dans (7.17) :

$$\mu_e n_e(\mathbf{r}) \vec{E}(\mathbf{r}) + (D_e/k_B T) n_e(\mathbf{r}) \nabla V(\mathbf{r}) = 0.$$

Comme  $\vec{E}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r})$ , on en déduit la relation d'Einstein pour les électrons  $D_e = (k_B T/\mu_e)$ .

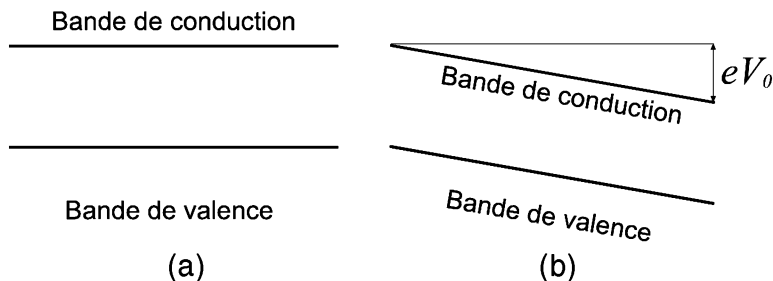
Le traitement des trous est analogue, à ceci près que leur énergie potentielle dans le champ  $V(\mathbf{r})$  vaut  $+eV(\mathbf{r})$ . Il en résulte que  $n_h(\mathbf{r}) \propto \exp(-eV(\mathbf{r})/k_B T)$  et  $\nabla n_h(\mathbf{r}) = (-e/k_B T) n_h(\mathbf{r}) \nabla V(\mathbf{r})$ . Par conséquent :

$$\mu_h n_h(\mathbf{r}) \vec{E}(\mathbf{r}) + \frac{D_h}{k_B T} n_h(\mathbf{r}) \nabla V(\mathbf{r}) = 0 \quad (7.18)$$

Ceci permet d'obtenir la relation d'Einstein pour les trous  $D_h = (k_B T/\mu_h)$ .

## 7.4 POTENTIEL EXTERNE ET BANDES D'ÉNERGIE

Les composants électroniques élémentaires sont soumis à des potentiels électriques extérieurs qui affectent la structure des bandes d'énergie. Nous allons évaluer cet effet dans des conditions particulièrement simples.



**Figure 7.2** La partie (a) représente les bandes d'énergie dans l'espace réel en fonction de l'abscisse  $x$  du semi-conducteur en l'absence d'un potentiel électrique extérieur. La partie (b) montre la modification subie par celles-ci lorsque l'on applique une différence de potentiel  $V_0$  entre les deux extrémités (la partie gauche est à la masse).

Considérons un barreau homogène de semi-conducteur de longueur  $L$  dont la section transverse est constante. En l'absence de potentiel extérieur, la structure de bandes du semi-conducteur est indiquée, en fonction de l'abscisse  $x$ , dans la figure 7.2 (a). Plaçons l'extrémité gauche du barreau semi-conducteur, située à l'abscisse  $x = 0$ , à la masse électrique ( $V = 0$ ) et l'extrémité de droite, située en  $x = L$ , au potentiel  $V_0$ . Compte-tenu de l'homogénéité du semi-conducteur et de la symétrie du problème, le potentiel électrique en  $x$  vaut  $V(x) = (x/L) V$ . L'énergie d'un électron de charge  $-e$  dépend du potentiel  $V(x)$  et donc de l'abscisse  $x$ . En effet, dans le potentiel  $V(x)$ , l'énergie de l'électron vaut  $-eV(x)$ . Elle est plus petite qu'au point  $x = 0$  où le potentiel électrique est nul. Par conséquent, les niveaux d'énergie sont déplacés vers le bas d'une quantité  $eV(x)$ . On obtient alors le diagramme en énergie de la figure 7.2 (b). Un potentiel électrique externe a pour conséquence d'incliner les bandes d'énergie. Lorsque le potentiel appliqué est positif, les niveaux d'énergie descendent. Lorsque le potentiel est négatif, ils montent.

## 7.5 L'EFFET HALL

L'*effet Hall*, découvert en 1979, est observé lorsque l'on applique un champ magnétique  $\mathbf{B}$  à un conducteur ou à un semi-conducteur parcouru par un courant électrique de densité de courant  $\mathbf{j}$ . Il apparaît alors un champ électrique perpendiculaire à  $\mathbf{j}$  et à  $\mathbf{B}$ , i.e. dans la direction du produit vectoriel  $\mathbf{j} \wedge \mathbf{B}$ . Ceci se traduit par une différence de potentiel, dans la direction normale au courant et au champ magnétique, appelée *tension de Hall*.

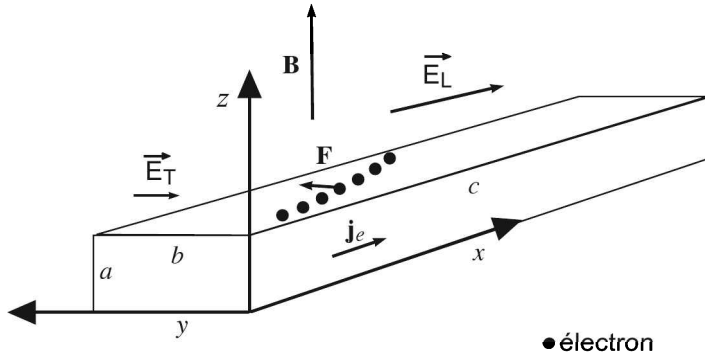


Figure 7.3 Effet Hall.

Nous allons calculer l'effet Hall dans la géométrie de la figure 7.3 dans laquelle nous considérons un barreau parallélépipédique de semi-conducteur de type  $n$ , de dimensions  $(a, b, c)$ . Son axe le plus long ( $c$ ) est orienté selon la direction  $x$ . Les porteurs de charge sont les électrons. Le courant, qui circule selon la direction  $x$ , crée un champ électrique longitudinal  $\vec{E}_L = (E_x, 0, 0)$  dans la même direction. La densité de courant  $\vec{j}_e$  est également longitudinale ( $\vec{j}_e = (j_x, 0, 0)$ ). Si l'on applique un champ magnétique  $\vec{B} = (0, 0, B_z)$  selon l'axe  $z$ , les électrons, dont la vitesse de dérive est  $\vec{v} = (v_x, 0, 0)$ , seront soumis à une force  $\vec{F} = -e\vec{v} \wedge \vec{B}$  orientée selon la direction  $y$  ( $\vec{F} = (0, F_y, 0)$ ). Les électrons, sous l'action de  $\vec{B}$ , vont se déplacer selon la direction  $-y$ . Ils ne peuvent pas aller très loin lorsque le circuit est ouvert et s'accumulent sur la face du parallélépipède située dans la direction  $-y$ . Par suite du départ des électrons, des charges positives s'accumulent sur la face opposée. Il y a donc création d'un champ électrique transverse dont l'intensité croît jusqu'à atteindre une valeur d'équilibre  $\vec{E}_T = (0, E_y, 0)$  qui permet à la force électrique d'équilibrer la force créée par le champ magnétique. À l'équilibre, la force électrique transversale est juste opposée à la force magnétique  $-e\vec{E}_T - e\vec{v} \wedge \vec{B} = 0$ . Comme on a les relations  $\vec{j}_e = -en\vec{v}$  et  $\vec{v} = -\mu_e \vec{E}_L$ , on en déduit que :

$$\vec{E}_T = -\vec{v} \wedge \vec{B} = \frac{1}{ne} (\vec{j}_e \wedge \vec{B}) = \mu_e (\vec{E}_L \wedge \vec{B}) \quad (7.19)$$

Soit, en utilisant les composantes des vecteurs  $E_y = -\mu_e E_x B_z$ . Le coefficient de Hall,  $R_H$ , est défini comme le rapport  $R_H = E_y / (B_z j_x) = -1 / (ne)$ . Le courant électrique longitudinal circulant dans le parallélépipède vaut  $I = abj_x$  et la tension transversale, appelée tension de Hall, est égale à  $V_H = bE_y$ . La constante de Hall peut donc, dans notre exemple, s'exprimer en fonction de quantités facilement mesurables  $R_H = (1/B_z) (V_H/b) (ab/I) = (aV_H/I B)$ .

Comme la conductivité d'un semi-conducteur de type  $n$  est donnée par  $\sigma_e = e\mu_e n$ , on en déduit que  $\mu_e = -R_H \sigma_e$ . Cette relation permet de calculer la mobilité après

avoir mesuré le coefficient de Hall et la conductivité du matériau. Puisque  $\sigma_e = e\mu_e n$ , on peut déterminer la concentration des porteurs.

Ce que nous venons de voir pour un semi-conducteur de type  $n$ , dans lequel les porteurs de charge majoritaires sont des électrons, s'applique aussi à un semi-conducteur de type  $p$  dans lequel les porteurs majoritaires sont des trous. La tension de Hall est alors opposée à la précédente et le signe du coefficient de Hall change. On a les relations  $R_H = 1/ne$ ,  $\sigma_h = e\mu_h n$  et  $\mu_h = R_H \sigma_h$ , où  $n$  est la concentration des trous.

L'effet Hall permet de déterminer expérimentalement le type de porteurs de charge dans un semi-conducteur grâce au signe du coefficient de Hall. La mesure de la conductivité donne alors la mobilité et la concentration des porteurs majoritaires. C'est une méthode très sensible puisque l'on peut mesurer des concentrations de porteurs de charges inférieures à  $10^{12}$  porteurs par  $\text{cm}^3$ , soit environ un porteur, *i.e.* impureté, pour  $10^{10}$  atomes de  $\text{Si}$ .

Ce modèle classique simple est souvent en bon accord avec l'expérience et permet de caractériser les semi-conducteurs. On obtient aussi un bon accord pour les métaux monovalents mais d'importants désaccords apparaissent pour certains métaux polyvalents (parfois sur le signe même du coefficient de Hall). Ceci vient des approximations utilisées qui supposent les porteurs de charge libres et néglige l'influence du potentiel périodique du cristal.

## EXERCICES

---

### Exercice 7.1

On considère un barreau parallélépipédique de semi-conducteur de longueur  $L$ , dont la surface de base vaut  $S$ . On applique un champ électrique constant  $\vec{E}$  parallèle au côté de longueur  $L$ . Montrer que la loi d'Ohm, exprimée sous sa forme microscopique,  $\vec{j} = \sigma \vec{E}$ , conduit à la loi d'Ohm macroscopique  $V = RI$ , où  $V$  est la différence de potentiel entre les deux extrémités du barreau et  $I$  l'intensité du courant qui y circule.

---

### Exercice 7.2

Considérons un semi-conducteur de type  $n$ . Nous allons nous placer dans l'approximation où l'on considère les électrons de conduction comme des particules indépendantes et nous traiterons leur interaction avec le réseau par une masse effective. On place le semi-conducteur dans un champ électrique  $\vec{E}$  constant.

1. La loi de Newton permet d'écrire la dérive de l'électron sous l'action du champ électrique. Si  $v_d$  est vitesse de dérive, écrire l'équation du mouvement correspondante.

2. Expliquer pourquoi cette équation ne peut pas traduire l'expérience.
3. La réalité est plus complexe car les électrons ne sont pas constamment accélérés, ils subissent des collisions avec des impuretés du cristal et sont soit ralentis soit arrêtés avant d'être à nouveau accélérés par le champ électrique extérieur. On peut traduire l'effet de ces collisions par une force de friction proportionnelle à la vitesse ( $\gamma v_d$ , où  $\gamma$  est une constante traduisant l'intensité de la « friction ») et opposée au mouvement de dérive de l'électron. Écrire l'équation du mouvement correspondante.
4. Montrer que la dérive des électrons augmente jusqu'à une vitesse limite  $v_d^*$ . Exprimer le coefficient de friction  $\gamma$  en fonction de  $e$  (charge de l'électron),  $\vec{E}$  et  $v_d^*$ .
5. En utilisant l'expression de  $\gamma$  obtenue, trouver l'expression de la force de dérive en fonction du temps  $t$ .
6. Donner l'expression du temps de relaxation  $\tau$  pour atteindre l'état stationnaire. Donner la valeur de la vitesse de dérive limite  $v_d^*$ .

### Exercice 7.3

Nous allons revenir sur l'effet Hall et considérer un barreau de semi-conducteur de type n. Nous nous placerons dans l'hypothèse d'un gaz d'électrons libres.

1. Donner l'expression de la force  $F$  exercée par un champ électrique  $\vec{E}$  et un champ magnétique  $B$  sur un électron de vitesse  $v$ .
2. On considère que la force obtenue, qui s'applique aux électrons libres dans le vide, est valable dans notre cas pour la vitesse moyenne des électrons (*i.e.* la vitesse de dérive  $v_d$ ) à la condition d'introduire aussi une force de friction, opposée au mouvement, de la forme  $-mv_d/\tau$ , où  $\tau$  est le temps de relaxation entre deux collisions. Donner l'équation du mouvement des électrons que l'on obtient.
3. Écrire les équations du mouvement pour les composantes en supposant que le champ magnétique est constant et orienté selon l'axe  $z$  ( $B = (0, 0, B_z)$ ).
4. Si  $\omega_c = eB_z/m$  est la fréquence cyclotronique, qu'obtient-on en régime stationnaire ? Exprimer ces relations en fonction de la densité, de la conductivité de Drude  $\sigma = ne^2\tau/m$  et de la densité de courant qui lui est reliée par la loi d'Ohm  $j = \sigma \vec{E}$ .
5. Plaçons-nous dans la configuration de la figure 7.3. Dans ce cas  $j_e = (j_x, 0, 0)$ . Trouver la relation entre  $E_y$  et  $E_x$ .
6. Calculer le coefficient de Hall,  $R_H = E_y/Bj_x$ .

## CORRIGÉS

### Exercice 7.1

Le champ électrique  $E$  et le potentiel  $V$  sont reliés par  $V = EL$ . La densité de courant et le courant sont reliés par  $I = jS$ . La loi d'Ohm microscopique se traduit par  $\frac{I}{S} = \sigma \frac{V}{L}$ . Si  $\rho = \frac{1}{\sigma}$  est la résistivité, on a  $V = \rho \frac{L}{S} I = RI$ .

### Exercice 7.2

1. En l'absence de champ électrique extérieur appliqué  $\vec{E}$ , les électrons de charge  $-e$ , vont dans toutes les directions et il n'y en a aucune qui soit privilégiée. Le champ électrique appliqué rompt cette symétrie et les électrons sont soumis à la force  $-e\vec{E}$ , opposée au champ électrique. La loi de Newton permet de décrire la dérive de l'électron sous l'action du champ électrique. Soit  $\mathbf{v}_d$  cette vitesse de dérive. L'équation du mouvement s'écrit, en tenant compte du fait que la masse des électrons est modifiée par le milieu (masse effective  $m^*$ ) :

$$m^* \frac{d\mathbf{v}_d}{dt} = -e \vec{E}$$

2. Cette équation du mouvement montre que l'accélération,  $\frac{-e \vec{E}}{m^*}$  existe tant que le champ électrique existe. Le mouvement est uniformément accéléré et la vitesse de dérive augmente proportionnellement au temps. Par ailleurs, lorsque le champ électrique disparaît après avoir été appliqué, le mouvement des électrons devient uniforme ce qui signifie qu'un courant électrique circule toujours. Ces deux conclusions sont en contradiction avec l'expérience.

3. L'équation de dérive de l'électron avec une force de friction proportionnelle à la vitesse ( $\gamma \mathbf{v}_d$ ) et opposée au mouvement de dérive de l'électron, s'écrit :

$$m^* \frac{d\mathbf{v}_d}{dt} = -e \vec{E} - \gamma \mathbf{v}_d \quad (7.20)$$

4. Les électrons sont accélérés jusqu'à une vitesse maximum  $\mathbf{v}_d^*$  qui est atteinte lorsque la force de friction est égale, en module, à la force électrique. Lorsque l'état stationnaire est atteint  $\frac{d\mathbf{v}_d}{dt} = 0$  et (7.20) se réduit à :

$$\gamma \mathbf{v}_d^* = -e \vec{E} \quad \Rightarrow \quad \gamma = \frac{-eE}{v_d^*} \quad (7.21)$$



5. Si l'on insère l'équation gauche de (7.20) dans (7.21), on obtient :

$$m^* \frac{d\mathbf{v}_d}{dt} + \frac{-e\mathbf{E}}{v_d^*} \mathbf{v}_d = -e \vec{\mathbf{E}}$$

La solution de cette équation est :

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}^* \left[ 1 - \exp \left( -\frac{-e\mathbf{E}}{m^* v^*} t \right) \right] = \left[ 1 - \exp \left( -\frac{t}{\tau} \right) \right]$$

6. La quantité  $\frac{m^* v^*}{e\mathbf{E}}$  a la dimension d'un temps que l'on appelle le *temps de relaxation*. Il est défini par :

$$\tau = \frac{m^* v^*}{e\mathbf{E}}$$

C'est le temps moyen entre deux collisions. Ceci permet d'écrire :  $v^* = \frac{\tau e \mathbf{E}}{m^*}$ .

### Exercice 7.3

1. La force vaut :

$$\mathbf{F} = -e \left[ \vec{\mathbf{E}} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B} \right]$$

2.  $m \frac{d\mathbf{v}_d}{dt} = -e \left[ \vec{\mathbf{E}} + \mathbf{v}_d \wedge \mathbf{B} \right] - m \frac{\mathbf{v}_d}{\tau}$

3.  $\left\{ \begin{array}{l} m \frac{dv_{dx}}{dt} = -e \left[ E_x + B_z v_{dy} \right] - m \frac{v_{dx}}{\tau} \\ m \frac{dv_{dy}}{dt} = -e \left[ E_y + B_z v_{dx} \right] - m \frac{v_{dy}}{\tau} \\ m \frac{dv_{dz}}{dt} = -e E_z - m \frac{v_{dz}}{\tau} \end{array} \right\}$

4. En régime stationnaire les dérivées temporelles s'annulent. On obtient :

$$\left\{ \begin{array}{ll} v_{dx} = -e\tau E_x/m - \omega_c \tau v_{dy} & \sigma E_x = \omega_c \tau j_y + j_x \\ v_{dy} = -e\tau E_y/m + \omega_c \tau v_{dx} & \text{soit } \sigma E_y = -\omega_c \tau j_x + j_y \\ v_{dz} = -e\tau E_z/m & \sigma E_z = j_z \end{array} \right\}$$

Pour obtenir les équations de droite, nous avons multiplié les deux membres des équations de gauche par  $ne$  et, en plus des relations données, nous avons tenu compte du fait que  $\mathbf{j} = -nev_d$ .

5. Compte tenu des conditions aux limites, on a

$$v_{dx} = -e\tau E_x/m \quad \text{et} \quad e\tau E_y/m = eB_z \tau v_{dx}/m$$

ce qui conduit à :

$$E_y = -\frac{eB\tau}{m}E_x.$$

6. Si l'on utilise la relation  $j_x = \frac{ne^2\tau}{m}E_x$ , on en déduit

$$E_y = -\frac{Bj_x}{ne}, \quad \text{soit} \quad R_H = \frac{E_y}{Bj_x} = -\frac{1}{ne}.$$

C'est le résultat déjà obtenu dans la section 7.5.



## Chapitre 8

---

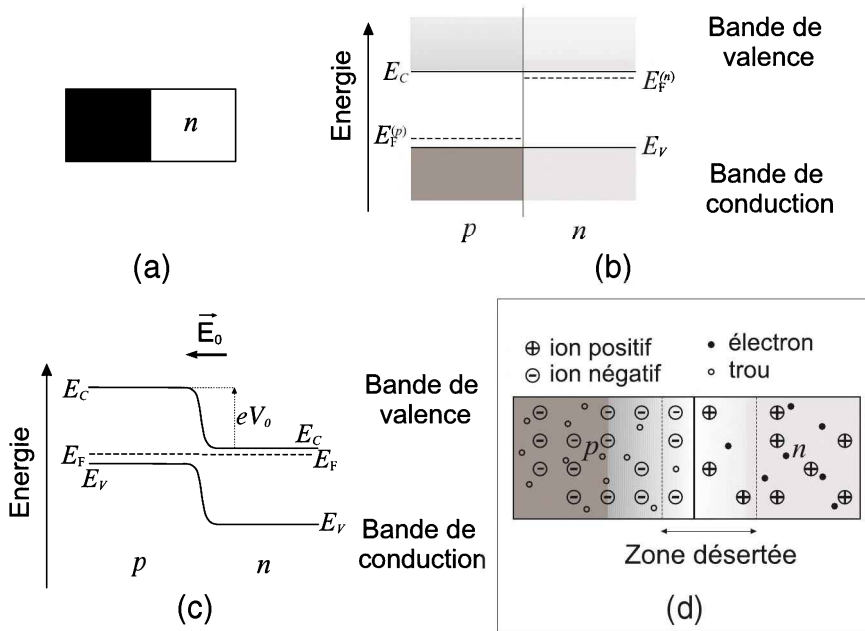
# Dispositifs élémentaires (I)

En associant des semi-conducteurs différents, métaux ou isolants, on peut créer des effets non linéaires qui permettent de contrôler les flux d'électrons. Ces effets permettent de réaliser des dispositifs élémentaires qui sont à la base des composants électroniques. Dans ce chapitre, nous nous limiterons aux composants formés par l'association de deux matériaux ayant des propriétés électroniques différentes. Nous verrons comment ces structures répondent à des potentiels électriques appliqués. Il est important que le lecteur assimile bien les notions présentées car elles sont nécessaires pour la compréhension du fonctionnement de dispositifs plus complexes.

Une application importante des composants électroniques concerne le *traitement de l'information* qui occupe une place croissante dans notre civilisation. Cette information, il faut la générer ou la détecter, la transmettre et la traiter. Les dispositifs électroniques permettent de faire ces différentes tâches mais il faut avoir une grande diversité de dispositifs pour y répondre.

### 8.1 LA JONCTION $pn$

Le dispositif semi-conducteur le plus simple est la jonction  $pn$ . Elle est constituée d'une zone de semi-conducteur de type  $p$  en contact avec une zone de semi-conducteur de type  $n$  (figure 8.1 (a)). La réalisation d'une jonction  $pn$  se fait sur le même substrat et ne peut pas être la juxtaposition physique d'un morceau de semi-conducteur de type  $p$  avec un morceau de semi-conducteur de type  $n$  car ceci ne conduirait en aucun cas à une jonction  $pn$ .



**Figure 8.1** (a) Schéma d'une jonction  $pn$ . (b) Schéma des bandes d'énergie des semi-conducteurs de type  $p$  et de type  $n$  avant contact. (c) Schéma des bandes d'énergie des semi-conducteurs de type  $p$  et de type  $n$  après contact, i.e. après formation de la jonction  $pn$ . Répartition des charges fixes et mobiles (d).

### 8.1.1 La jonction $pn$ à l'équilibre

Pour comprendre la nature électrique de ce dispositif, nous allons le construire de façon fictive en mettant en contact deux morceaux de semi-conducteurs, l'un de type  $p$ , l'autre de type  $n$ . Ceci est bien sûr tout à fait imaginaire puisqu'on ne peut pas réaliser une diode  $pn$  ainsi. Néanmoins, cette expérience par la pensée va nous permettre de comprendre les phénomènes physiques qui conduisent à la formation de la jonction.

Dans la figure 8.1 (b), nous avons représenté le diagramme en énergie de chacun des morceaux de semi-conducteur avant leur mise en contact. Les énergies sont données par rapport à une énergie de référence,  $E_{\text{vide}}$ , qui n'est pas représentée sur la figure. Cette dernière est l'énergie d'un électron au repos situé, dans le vide, à l'infini du semi-conducteur, donc sans interaction avec ce dernier. Pour le semi-conducteur de type  $p$ , le niveau de Fermi est proche de la bande de valence alors qu'il est proche de la bande de conduction pour le semi-conducteur de type  $n$  (figure 6.6).

Cette disposition des niveaux d'énergie est modifiée lors de la mise en contact des deux semi-conducteurs. En effet, les parties  $n$  et  $p$  ayant des énergies de Fermi (potentiels chimiques) différentes, le système n'est pas en équilibre. Il va donc évoluer, grâce à des échanges de particules, vers l'état d'équilibre dans lequel le potentiel

chimique est le même en tout point. Le diagramme d'énergie de la configuration d'équilibre est schématisé dans la figure 8.1 (c). La transition de la zone  $p$  à la zone  $n$  ne se produit pas brusquement mais se fait sur une certaine distance.

À l'interface des deux semi-conducteurs, il apparaît une variation d'énergie  $eV_0$  ( $e$  est la charge élémentaire positive), donc une variation de potentiel  $V_0$ . Le potentiel de la zone  $p$  est supérieur à celui de la zone  $n$  ce qui est assez simple à retenir ( $p$  pour positif et  $n$  pour négatif). On peut calculer  $V_0$  en utilisant les résultats de la section 6.9. Soit  $N_a$  le nombre d'atomes accepteurs et  $N_d$  le nombre d'atomes donneurs. Dans la région  $n$ , loin de l'interface, nous avons  $E_F^{(n)} - E_F^{(i)} = k_B T \text{Log} (N_d/n_i)$  et dans la région  $p$  :  $E_F^{(i)} - E_F^{(p)} = k_B T \text{Log} (N_a/n_i)$ . La quantité  $eV_0$  est définie par :

$$eV_0 = E_F^{(n)} - E_F^{(p)} = k_B T \text{Log} \left( \frac{N_a N_d}{n_i^2} \right) \Rightarrow V_0 = \frac{k_B T}{e} \text{Log} \left( \frac{N_a N_d}{n_i^2} \right) \quad (8.1)$$

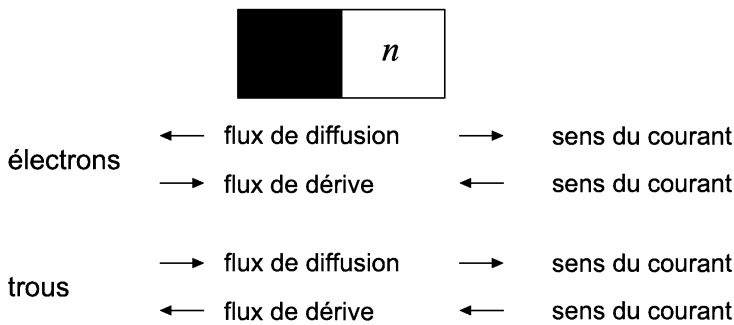
Le potentiel  $V_0$  est d'autant plus grand que le dopage est élevé. Dans les diodes actuelles on dope une région beaucoup plus que l'autre. On peut avoir, par exemple,  $N_a = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  et  $N_d = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ .

La condition d'égalité des potentiels chimiques à l'équilibre permet de comprendre l'apparition d'une différence de potentiel entre la zone  $p$  et la zone  $n$ . Si nous imaginons le mouvement d'ensemble des porteurs de charge lors de la formation de la jonction, on peut accéder à la structure de la zone de transition au voisinage de l'interface du domaine  $p$  et du domaine  $n$ . Pour cela, reprenons notre expérience fictive dans laquelle nous mettons en contact les parties  $p$  et  $n$ . Au voisinage de l'interface, des électrons de la zone  $n$  vont diffuser dans la zone  $p$  qui est pauvre en électrons ; ils se recombinent aux trous présents dans cette zone. De même, des trous de la zone  $p$  vont diffuser vers la zone  $n$  qui est pauvre en trous ; ils se recombinent aux électrons de cette zone. Ce processus résulte du fait que les énergies de Fermi des deux zones ne sont pas égales. Les électrons et les trous sont des porteurs de charge *mobiles*. Toutefois, il ne faut pas oublier qu'il y a aussi des ions aux nœuds du réseau cristallin. Ceux-ci ne peuvent migrer et restent en place lorsqu'un électron ou un trou diffuse dans l'autre zone. Par conséquent, lors de la diffusion des électrons et des trous, il va progressivement y avoir un excédent de charges positives (ions des impuretés donneurs) près de l'interface  $n$  et un excédent de charges négatives (ions des impuretés accepteurs) près de l'autre interface. Au total, ce processus de diffusion crée, dans la région de la zone  $p$  proche de l'interface, une charge négative et, dans la zone  $n$  près de l'interface, une charge positive. Ceci est résumé schématiquement sur la figure 8.1 (d). Un champ électrique,  $\vec{E}_0$ , dirigé de  $n$  vers  $p$  se construit progressivement (figure 8.1 (c)). La diffusion d'électrons et de trous continue jusqu'à ce que ce champ électrique, devenu trop important, arrête le processus. Dans ce cas on a atteint l'équilibre et les énergies de Fermi sont égales.

Les régions proches de l'interface de la jonction ont perdu une partie de leurs porteurs de charges (électrons pour la partie  $n$ , trous pour la partie  $p$ ) ; elles constituent

ce que l'on appelle la *zone de déplétion* ou *zone désertée*. La description que nous venons de faire est un processus moyen au sens statistique. En fait, à chaque instant, des porteurs de charge traversent l'interface dans les deux sens comme les molécules d'un gaz traversent une interface perméable aux particules séparant deux gaz en équilibre.

Les phénomènes qui gouvernent la dynamique des porteurs de charge sont la diffusion et la dérive. La force qui s'exerce sur les porteurs de charge provenant du processus de diffusion a pour origine la différence de potentiel chimique entre les zones  $n$  et  $p$ , *i.e.* le gradient de concentration entre ces deux zones. La force issue du processus de dérive provient du champ électrique qui est présent au voisinage de l'interface. Les deux forces conduisent à des courants opposés. Pour un porteur de charge, électron ou trou, l'équilibre est atteint lorsque le courant de diffusion est égal et opposé au courant de dérive. Le sens du flux des particules provenant des processus de diffusion et de dérive est indiqué dans la figure 8.2 ainsi que le sens des courants électriques associés.



**Figure 8.2** Sens des différents courants et flux circulant dans une jonction  $pn$ .

Soit  $\ell_p$  la largeur de la zone de déplétion de la zone  $p$  et  $\ell_n$  celle de la zone  $n$ . Supposons que le nombre d'accepteurs par unité de volume dans la zone  $p$  soit  $N_a$  et que celui des donneurs d'électrons dans la zone  $n$  soit  $N_d$ . Nous supposons, pour simplifier, que toutes ces impuretés sont ionisées, *i.e.* qu'elles ont perdu, ou acquis, l'électron supplémentaire. Dans la zone de déplétion, la neutralité électrique implique que le nombre de charges positives dans la zone désertée  $n$  soit égal au nombre de charge négatives dans la zone  $p$ . Ceci se traduit par l'équation  $N_a \ell_p = N_d \ell_n$ .

Si le dopage des deux zones est différent, ce qui est souvent le cas, les zones de déplétion ont des largeurs différentes. La largeur de la zone de déplétion totale,  $\ell = \ell_p + \ell_n$ , est pratiquement celle de la zone la moins dopée. De manière générale, en supposant que la concentration des porteurs de charge minoritaires, *i.e.* issus du semi-conducteur intrinsèque, est négligeable par rapport à celle provenant des impuretés, on peut montrer que, si  $\epsilon$  est la constante diélectrique,  $\ell_p$  et  $\ell_n$  sont respectivement

données par les relations :

$$\ell_p = \sqrt{\frac{2\epsilon}{e} V_0 \frac{N_d}{N_a(N_a + N_d)}} \quad \text{et} \quad \ell_n = \sqrt{\frac{2\epsilon}{e} V_0 \frac{N_a}{N_d(N_a + N_d)}} \quad (8.2)$$

### 8.1.2 La jonction pn polarisée

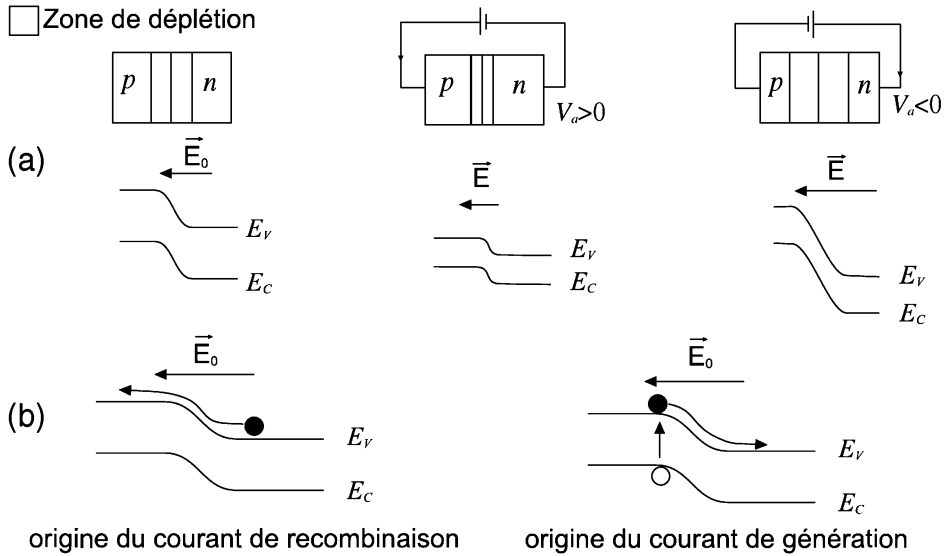
Lorsque la jonction *pn* est à l'équilibre, il existe, à l'interface des semi-conducteurs *n* et *p*, une zone désertée et une barrière de potentiel de hauteur  $eV_0$ . Celle-ci s'oppose à la diffusion additionnelle des électrons de la zone *n* vers la zone *p*. Elle a pour origine les charges des ions accepteurs ou donneurs qui ne sont plus compensées par les porteurs de charges qui leurs sont associés par suite de la migration de ceux-ci, vers la zone *p* pour les électrons, et vers la zone *n* pour les trous. Voyons maintenant ce qui se passe si l'on applique une différence de potentiel  $V_a$ , entre la zone *p* et la zone *n*. Nous supposons que  $V_a > 0$  lorsque le potentiel de la zone *p* est supérieur à celui de la zone *n*. Si, par exemple, la zone *p* est mise à la masse, cela signifie que le potentiel de la zone *n* est égal à  $-V_a$ <sup>1</sup>. La résistivité de la zone désertée est bien supérieure à celle des régions *n* et *p* puisque la concentration en porteurs de charge y est très faible. Par conséquent, la différence de potentiel appliquée aux bornes de la jonction se retrouve pratiquement dans sa totalité aux bornes de la zone de déplétion.

Si  $V_a > 0$ , l'énergie potentielle correspondante d'un électron varie de  $eV_a$  puisque le potentiel dans la zone *n* vaut  $-V_a$ . Ceci a pour conséquence de diminuer la hauteur de la barrière de potentiel  $eV_0$  d'une valeur égale à  $eV_a$ . Si, par contre,  $V_a < 0$ , la variation de l'énergie potentielle d'un électron de la zone *n* vaut  $-eV_a$  puisque le potentiel de cette zone vaut  $+V_a$ . La hauteur de la barrière de potentiel est alors augmentée de  $eV_a$ . En résumé, la hauteur de la barrière de potentiel  $V$  en fonction de la tension appliquée entre la zone *p* et la zone *n* vaut  $eV = eV_0 - eV_a$ . L'application d'une tension revient à séparer les niveaux de Fermi des régions *n* et *p* d'une quantité  $eV_a$ . Ceci est résumé dans la figure 8.3 (a).

Voyons ce qui se passe au niveau du champ électrique. Il découle, de la différence de potentiel  $V_a$ , un champ électrique  $\vec{E}_a$  qui va de la zone *n* vers la zone *p* si  $V_a < 0$  et de la zone *p* vers la zone *n* si  $V_a > 0$ . Dans le premier cas, il s'ajoute au champ électrique  $\vec{E}_0$ ; dans le second, il s'en retranche. Au total,  $\vec{E} = \vec{E}_0 + \vec{E}_a$ . Si  $V_a < 0$ , le passage des électrons de la zone *n* vers la zone *p* devient plus difficile qu'avant la polarisation de la jonction. Lorsque  $V_a > 0$ , on dit que la jonction *pn* est polarisée dans le sens direct alors que lorsque  $V_a < 0$ , on dit qu'elle est polarisée dans le sens inverse.

1. Ne pas confondre la différence de potentiel  $V_a = 0 - (-V_a)$  avec le potentiel  $-V_a$ .





**Figure 8.3** (a) Évolution de la largeur de la zone de déplétion et de la structure de bande en fonction de la tension appliquée à la jonction  $pn$ .  
 (b) origine des deux courants circulant dans la jonction  $pn$ . Le cercle plein représente un électron et le cercle vide un trou.

Lorsque la jonction est polarisée en inverse, *i.e.* lorsque le côté  $n$  est porté à une tension positive par rapport au côté  $p$ , la jonction est « bloquante » à la fois pour les électrons et pour les trous. À température non nulle, il y a toujours des porteurs de charge, électrons ou trous, qui franchissent cette barrière et leur flux conduit à un courant appelé « *courant inverse* ». Les porteurs de charge qui contribuent au courant inverse sont les *porteurs minoritaires*. L'intensité de ce courant croît fortement avec la température. Par exemple, pour le silicium, il double tous les 11 °C. Ce courant est souvent dénommé de manière différente selon le dispositif ; ainsi, pour la diode, on l'appelle *courant de fuite* alors que pour la photodiode on emploie plutôt le terme de *courant d'obscurité*. Si on le mesure en fonction de la température et si l'on extrapole cette quantité au zéro absolu, on obtient une valeur,  $I_0$ , appelée *courant inverse de saturation*. Le courant inverse est presque indépendant de la tension de polarisation (en sens inverse). Au delà d'une certaine tension, appelée tension de rupture, on a, en général, destruction du composant.

Lorsque la jonction est polarisée dans le sens « passant », *i.e.* lorsque la zone  $n$  est portée à un potentiel négatif par rapport à la zone  $p$ , la barrière de potentiel est abaissée. Les *porteurs majoritaires* (électrons pour la zone  $n$  et trous pour la zone  $p$ ) vont plus facilement circuler. Le courant  $I$ , qui circule de la zone  $p$  vers la zone  $n$  peut alors s'exprimer sous la forme  $I = I_0 [\exp(eV/k_B T) - 1]$ . Cette expression est

aussi valable lorsque la diode est polarisée en inverse, la tension  $V$  étant alors négative. À la température ordinaire, la quantité  $k_B T/e$  vaut environ 0,025 volt.

Une tension appliquée à une jonction  $pn$  change la largeur de la zone désertée (figure 8.3 (a)). Si la jonction est polarisée en direct, les champs électriques  $\vec{E}_0$  et  $\vec{E}_a$  sont en sens inverse. Ceci signifie que le nombre d'impuretés non compensées est plus faible qu'en l'absence de polarisation. La zone désertée est donc moins large et sa largeur diminue lorsque la tension appliquée augmente.

Si la jonction est polarisée en inverse, les champs électriques  $\vec{E}_0$  et  $\vec{E}_a$  sont dans le même sens. Ceci signifie qu'il y a plus d'impuretés non compensées ; la largeur de la zone désertée augmente lorsque la différence de potentiel devient de plus en plus négative.

Voyons maintenant à présent l'évolution des différents flux de porteurs de charge lorsqu'il y a une tension extérieure. Nous parlons bien sûr de flux moyens puisqu'il y a toujours des porteurs de charge qui traversent l'interface de la jonction dans les deux sens. Rappelons que le courant de diffusion provient du gradient de concentration des impuretés dans les deux zones et que le courant de dérive a pour origine le champ électrique  $\vec{E}_0$  créé par les impuretés ionisées non compensées. Le courant de diffusion est constitué des porteurs de charge majoritaires alors que le courant de dérive provient des porteurs de charge minoritaires qui sont créés sous l'influence de la température. Nous allons considérer les électrons.

Le courant de diffusion est formé des électrons majoritaires de la zone  $n$  dont l'énergie cinétique est suffisante pour franchir la barrière de potentiel  $eV$ . Seuls les électrons ayant une énergie située dans la partie haute de la distribution peuvent franchir la barrière avec une probabilité notable. On désigne ce courant sous le nom de *courant de recombinaison* car les électrons qui franchissent la barrière de potentiel se recombinent, dans la zone  $p$ , avec les trous.

Le courant de dérive est constitué des électrons minoritaires de la zone  $p$  qui résultent de l'excitation thermique du semi-conducteur. Au cours de cette excitation, un électron apparaît dans la bande de conduction et un trou dans la bande de valence. Ce courant est appelé, pour cette raison, *courant de génération*. Les électrons concernés par ces processus sont ceux qui se trouvent, dans la zone  $p$ , à une distance de la zone désertée inférieure à leur longueur de diffusion sinon ils se recombinent avec un trou avant d'atteindre celle-ci. Ces deux processus, diffusion et dérive, sont illustrés respectivement dans les deux parties de la figure 8.3 (b) (recombinaison et génération).

Cette brève discussion nous indique que moins la hauteur de la barrière est élevée, plus le nombre d'électrons majoritaires qui peuvent la franchir est grand. Par conséquent, on s'attend à ce que le courant dû aux porteurs majoritaires augmente lorsque la différence de potentiel appliquée, positive, augmente. Par contre, on s'attend à ce que le courant dû aux porteurs minoritaires, qui provient essentiellement de l'énergie d'agitation thermique, soit indépendant de la tension appliquée. C'est ce

que l'on observe lorsque l'on mesure la caractéristique d'une jonction *pn* qui est la variation de son courant en fonction de la tension appliquée  $V_a$ . Celle-ci est montrée schématiquement dans la figure 8.4. Lorsque  $V_a < 0$ , le courant, dit inverse, est faible et à peu près constant puisqu'il provient des porteurs minoritaires. Pour  $V_a > 0$ , ce courant augmente fortement avec  $V_a$  ; il est dominé par les porteurs majoritaires. Cette caractéristique est celle d'un dispositif redresseur car le courant passe dans un sens mais pratiquement pas dans l'autre ; la jonction *pn* est donc une *diode*.

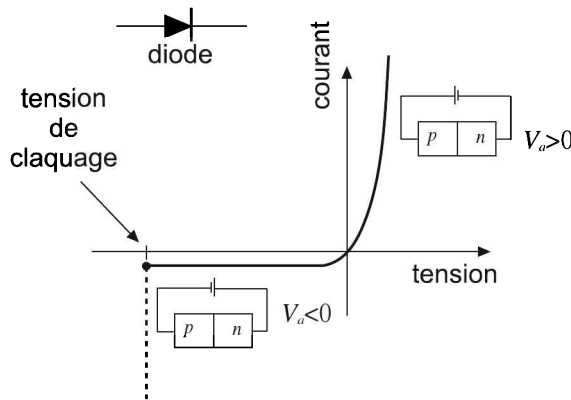


Figure 8.4 Caractéristique de la jonction *pn*.

## 8.2 PERTURBATIONS DUES À LA SURFACE

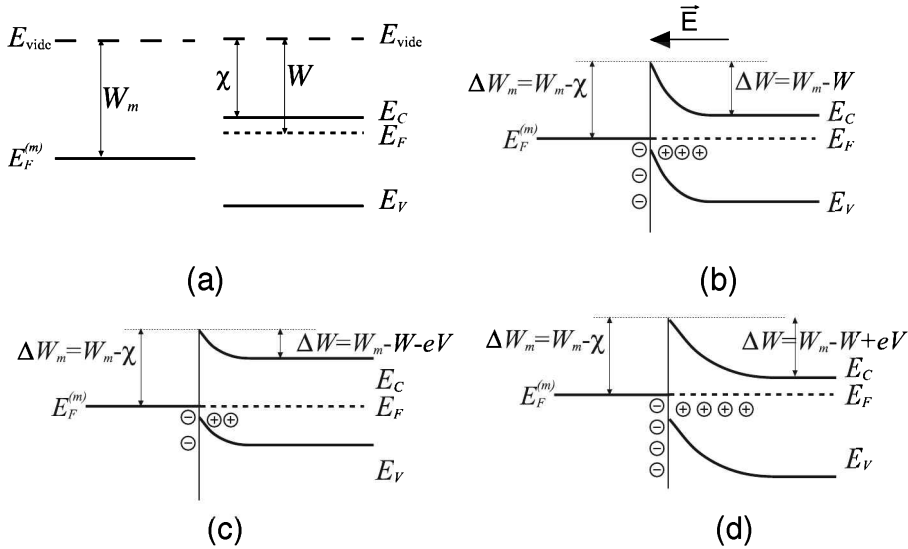
Un cristal réel a une extension spatiale finie et donc une surface qui le sépare du milieu extérieur. Celle-ci perturbe sa structure électronique en introduisant des niveaux d'énergie, localisés en surface, dans la bande interdite. Ces *états de surface*, peuvent jouer un rôle (effet photoélectrique, par exemple) et modifier certaines propriétés électroniques des semi-conducteurs. Par ailleurs, la présence d'une surface implique l'existence d'impuretés qui se déposent sur celle-ci. Bien que nous négligions ces effets dans la suite, en considérant des interfaces parfaites, nous allons néanmoins examiner qualitativement quelques perturbations induites par l'existence d'une surface dans un semi-conducteur.

### 8.2.1 Effets de surface

La description la plus simple des électrons dans un réseau cristallin suppose que le réseau crée un potentiel constant et que les électrons forment un gaz de particules indépendantes. L'énergie de Fermi,  $E_F$ , est habituellement mesurée par rapport à un électron du réseau ayant un vecteur d'onde nul, ce qui est possible puisque l'on

suppose le réseau infini. Toutefois, le cristal n'est pas infini : il a une surface. Nous allons étudier ce qui se passe au voisinage de cette surface dans le cas d'un cristal placé dans le vide.

Pour que les électrons restent dans le cristal, malgré l'existence du vide qui entoure celui-ci, il faut que le potentiel constant dont nous avons parlé plus haut soit négatif. L'énergie de Fermi doit également, par rapport à l'énergie du vide, être négative sinon des électrons seraient spontanément émis du cristal. L'énergie minimale  $W$  nécessaire pour extraire un électron est appelée le *travail d'extraction*. Ce dernier représente en fait la valeur de l'énergie de Fermi évaluée par rapport à l'énergie du vide  $E_{\text{vide}}$  ; on a donc  $W = E_{\text{vide}} - E_F$ . Ceci est explicité dans la figure 8.5 (a). L'affinité électronique  $\chi$  du semi-conducteur est définie comme l'énergie nécessaire pour arracher un électron situé au bas de la bande de conduction :  $\chi = E_{\text{vide}} - E_C$ .



**Figure 8.5** (a) Définition du travail d'extraction  $W$  et de l'affinité  $\chi$ . (b) Courbure des bandes pour un semi-conducteur de type  $n$  et (c) de type  $p$ . (d) Blocage du niveau de Fermi.

Considérons maintenant un semi-conducteur de type  $n$ . La transition du volume du semi-conducteur vers le vide est continue même si cela se produit sur une très courte distance. Par conséquent, le potentiel électrique décroît progressivement d'une valeur constante, dans le volume, à une valeur nulle, à l'extérieur<sup>2</sup>. Une variation de charge est associée à cette évolution du potentiel au voisinage de la surface et il y a un excès d'électrons sur la surface. Il en résulte un déficit de la probabilité de présence

2. Les électrons étant liés dans le volume, leur énergie potentielle est négative. Comme leur charge est négative, le potentiel électrique doit être positif.

d'électrons près de la surface, à l'intérieur de celle-ci. Les ions du réseau créent donc un excès de charges positives par rapport à la neutralité électrique. On forme une double couche chargée positivement à l'intérieur et négativement en surface. Celle-ci crée ainsi un champ électrique répulsif pour les électrons dont l'effet est inclus dans la définition du potentiel d'extraction.

Cette description est très simplifiée car nous avons négligé toute impureté en surface et supposé que les caractéristiques géométriques du réseau ne changent pas au voisinage de l'interface. La réalité est plus complexe avec l'apparition de niveaux d'énergie ayant pour origine cette même surface et la présence d'impuretés. Néanmoins, la notion de potentiel d'extraction subsiste.

Les niveaux d'énergie issus de l'existence de la surface sont appelés *états de surface*. Leur densité est celle des atomes en surface, *i.e.* proche de  $10^{15} \text{ cm}^{-2}$ . La probabilité de transition d'un électron de ces états vers un état à l'intérieur du volume du semi-conducteur est grande et se produit en un temps court (typiquement de l'ordre de grandeur de la microseconde) ; on les désigne pour cette raison sous le nom d'*états de surface rapides*. Il existe aussi, à cause des impuretés, des états de surface dont la probabilité de transition vers les états de volume est petite, avec des temps de transition typiquement de l'ordre de la seconde : ce sont des *états de surface lents* qui correspondent souvent à des impuretés extérieures déposées ou formées en surface, volontairement ou non. Ils peuvent jouer le rôle d'accepteurs ou de donneurs d'électrons. C'est en particulier le cas de l'oxyde de silicium (silice) dont l'oxygène joue le rôle d'accepteur d'électrons pour le silicium.

L'idée simplificatrice d'une transition brutale au voisinage de la surface est bien adaptée à la physique des semi-conducteurs lorsque l'on considère l'interface entre deux matériaux qui ont des structures cristallines très voisines. C'est en particulier le cas des structures semi-conductrices qui intéressent l'électronique. On peut alors traiter les problèmes d'interface à partir des propriétés de volume de chacun des matériaux.

Nous supposerons que l'interface entre les deux matériaux est parfaite, plane, régulière et que la transition se fait de manière abrupte.

### 8.2.2 Courbure de bande au voisinage de la surface

Considérons un semi-conducteur de type  $n$  qui possède des niveaux accepteurs en surface que l'on suppose vides (tous leurs électrons sont passés dans la bande de conduction). Ces niveaux ont une énergie inférieure à celle des niveaux donneurs et vont donc être occupés par des électrons provenant des niveaux donneurs qui sont spatialement proches d'eux. Il en résulte une charge négative en surface et une charge positive, près de la surface mais à l'intérieur du semi-conducteur. Cette dernière provient des impuretés donneurs non compensées. Il se crée donc un champ électrique  $\vec{E}$  dirigé de l'intérieur vers la surface qui s'oppose à ce que des électrons supplémentaires migrent en surface. Puisque le champ électrique est dirigé de l'intérieur

du semi-conducteur vers la surface, le potentiel électrique  $V_s$  croît de la surface vers l'intérieur. Comme le potentiel électrique est plus grand à l'intérieur qu'en surface, l'énergie d'un électron dans le volume du semi-conducteur est inférieure à celle d'un électron en surface d'une quantité égale à  $eV_s$ . Au voisinage de la surface, la bande d'énergie est courbée vers le haut. Ceci est résumé dans la figure 8.5 (b).

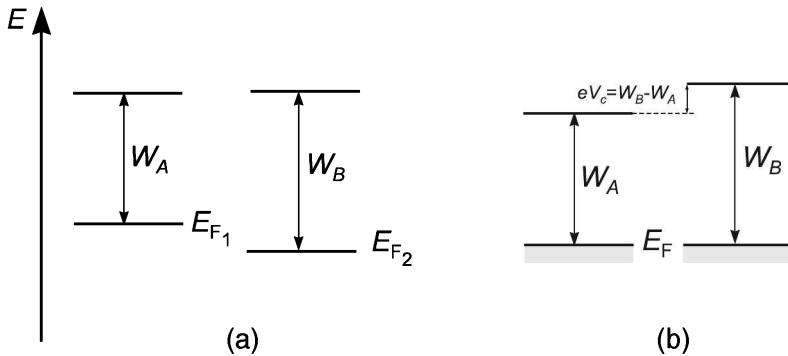
Un raisonnement analogue peut être fait avec un semi-conducteur de type  $p$  possédant des états donneurs en surface qui sont complètement ionisés. Il se forme une charge positive en surface et négative dans le volume proche de celle-ci. Le potentiel électrique diminue lorsque l'on va de la surface vers l'intérieur et la courbure des bandes d'énergie est vers le bas (8.5 (c)).

La situation que nous venons de décrire suppose un nombre d'états de surface suffisamment faible pour que les accepteurs ou les donneurs correspondants soient complètement ionisés. À l'équilibre, le niveau de Fermi,  $E_F$ , est fixé par celui existant dans le volume du semi-conducteur. Les niveaux donneurs (qui sont vides), dans le cas d'un semi-conducteur de type  $n$ , sont au-dessus de  $E_F$  et les niveaux accepteurs (qui sont pleins) sont au-dessous de  $E_F$ . La situation est différente lorsque les impuretés en surface sont très nombreuses. Illustrons cette situation pour un semi-conducteur de type  $p$  et supposons que les niveaux donneurs soient situés à une distance  $\Delta$  du bas de la bande de conduction. À l'équilibre, toutes les impuretés donneurs en surface ne sont pas ionisées. Par conséquent, puisque certains niveaux en surface sont encore occupés, l'énergie de Fermi en surface est située à une distance  $\Delta$  au-dessous de la bande de conduction. À l'équilibre, l'énergie de Fermi doit être la même partout. Par conséquent, le flux d'électrons allant du volume vers la surface s'arrête lorsque  $E_F$  est égal à l'énergie du niveau donneur. L'énergie de Fermi à l'équilibre est donc indépendante du dopage en volume du semi-conducteur : il y a blocage du niveau de Fermi (figure 8.5 (d)).

### 8.3 LA JONCTION MÉTAL-MÉTAL

Nous allons étudier la jonction de deux métaux en contact qui est une bonne introduction à la jonction entre un semi-conducteur et un métal. Nous avons défini plus haut l'énergie minimum qu'il faut fournir pour arracher un électron à un métal ; c'est le *travail* (ou *potentiel*) *d'extraction*  $W$ . Il représente la différence entre l'énergie du vide et celle du niveau de Fermi,  $E_F$  (figure 8.6 (a)).

Considérons deux métaux  $A$  et  $B$  ayant, respectivement, des niveaux de Fermi  $E_{F_1}$  et  $E_{F_2}$ , et des travaux d'extraction  $W_A$  et  $W_B$  (figure 8.6 (a)). Nous supposons  $E_{F_1} > E_{F_2}$  pour la discussion. Lors de la création de la jonction métal-métal, les niveaux de Fermi s'équilibrent. Pour cela, des électrons du métal  $B$  vont passer vers le métal  $A$ . Il s'ensuit que le voisinage de la jonction se charge positivement du côté du métal  $B$  car les atomes du réseau sont fixes et que des électrons ont quitté cette région.



**Figure 8.6** Principe de formation de la jonction métal-métal. La figure (a) montre le diagramme d'énergie des deux métaux séparés. La figure (b) correspond au cas où la jonction métal-métal est formée.

Au contraire, le voisinage de la jonction du métal  $A$  se charge négativement par suite d'un excès d'électrons. À l'équilibre, *i.e.* lorsque les potentiels chimiques des deux métaux sont égaux, il y a un champ électrique, qui empêche que tous les électrons de  $B$  passent en  $A$ . Le potentiel de contact  $V_c$  vaut  $V_c = (W_B - W_A) / e$ . Ce potentiel de contact est indiqué sur la figure 8.6 (b). Pour un contact entre de l'argent et de l'or, par exemple, on a  $V_c = +0,5$  V ( $W_{Ag} = 4,33$  eV et  $W_{Au} = 4,83$  eV).

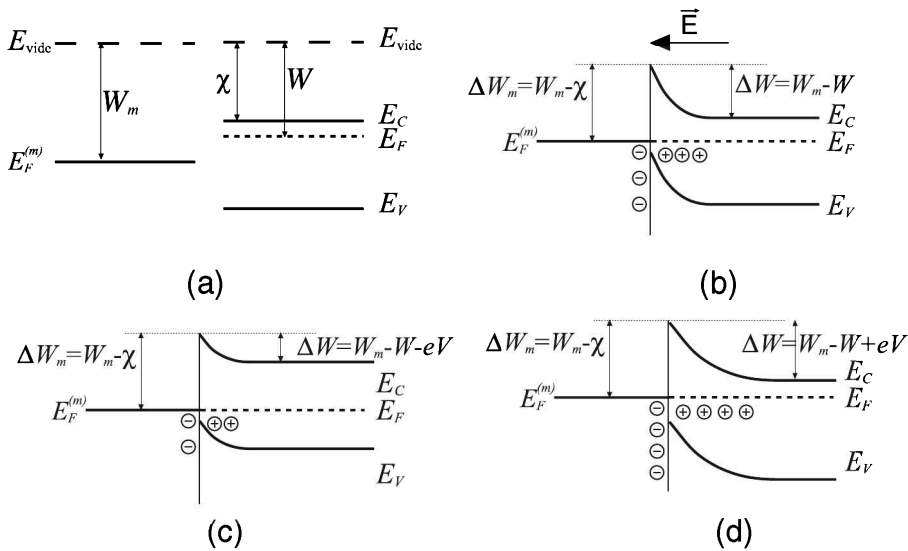
Le thermocouple est l'application la plus simple de la jonction métal-métal. On peut aussi considérer des configurations de type  $A-B-A$ . Si l'on fait circuler un courant dans ce dispositif, on observe que la température d'une des jonctions augmente alors que celle de l'autre diminue ; c'est l'*effet Peltier* qui peut être utilisé pour refroidir des dispositifs électroniques. Si, d'un autre côté, on maintient les deux jonctions à des températures différentes, on observe une différence de potentiel aux bornes du dispositif ; c'est l'*effet Seebeck*.

## 8.4 LA JONCTION MÉTAL-SEMI-CONDUCTEUR

Lorsqu'un métal est mis en contact avec un semi-conducteur, les niveaux de Fermi s'équilibrent. Deux cas peuvent se présenter selon la valeur relative du travail d'extraction du métal et du semi-conducteur. Pour la discussion, nous allons considérer un semi-conducteur de type  $n$  dont le travail d'extraction vaut  $W$  et un métal dont le travail d'extraction vaut  $W_m$ . Les deux situations à considérer sont celles pour lesquelles on a  $W_m > W$  et  $W_m < W$ . Dans la première, on a un effet redresseur analogue à celui observé dans le cas d'une diode  $pn$  ; c'est la *diode de Schottky*. Dans la seconde ( $W_m < W$ ), on a un *contact ohmique*.

### 8.4.1 La diode Schottky

La diode Schottky est constituée d'un métal en contact avec un semi-conducteur. Les deux matériaux sont choisis tels que  $W_m > W^3$ . Lorsque les deux éléments sont séparés, on a le diagramme en énergie schématisé dans la figure 8.7 (a). L'affinité électronique du semi-conducteur  $\chi$  est l'énergie nécessaire pour arracher un électron situé dans le bas de la bande de conduction. Si  $E_{\text{vide}}$  est l'énergie du vide, le travail d'extraction du métal est défini par  $W_m = E_{\text{vide}} - E_F^{(m)}$  et celui du semi-conducteur par  $W = E_{\text{vide}} - E_C$ . L'affinité vaut  $\chi = E_{\text{vide}} - E_C$  où  $E_C$  est l'énergie du minimum de la bande de conduction.



**Figure 8.7** Principe de formation d'une jonction métal-semi-conducteur dans le cas où  $W_m > W$ . La figure (a) montre le diagramme d'énergie des deux matériaux séparés. La figure (b) correspond au cas où la jonction métal-semi-conducteur s'est formée, il s'agit là d'une jonction Schottky. Les figures (c) et (d) correspondent au cas où l'on applique une tension extérieure.

Lors de l'évaporation du métal sur le semi-conducteur, les niveaux de Fermi s'alignent et l'on obtient le diagramme montré schématiquement sur la figure 8.7 (b). Pour le cas que nous considérons ici, des électrons passent du semi-conducteur vers le métal. Les niveaux d'énergie du semi-conducteur  $n$  se décalent vers le bas d'une quantité égale à  $\Delta W = W_m - W$ . C'est précisément la hauteur de la barrière que voit un électron situé dans le bas de la bande de conduction du semi-conducteur. La hauteur de la barrière est différente vue du côté du métal. En effet, il faut rajouter, à  $\Delta W$ , la quantité  $E_C - E_F$  puisque le niveau de Fermi du métal correspond à la plus

3. Pour un semi-conducteur de type  $p$  la jonction Schottky est obtenue lorsque  $W_m < W$ .



grande valeur de l'énergie d'un électron. On a donc, pour le métal, une barrière égale à  $\Delta W_m = W_m - \chi$ .

Lors de la formation de la jonction métal–semi-conducteur, des électrons vont donc, au voisinage de la jonction, passer du semi-conducteur vers le métal jusqu'à ce que les niveaux de Fermi soient égaux. Les atomes, chargés positivement, ne migrent bien évidemment pas. On va ainsi créer, au voisinage de la jonction, une zone de déplétion dans le semi-conducteur, appauvrie en porteurs de charges libres. Par contre, au niveau du métal, il se produit une accumulation de charges négatives (les électrons) en surface ; il n'y a pas de zone de déplétion. À l'équilibre, *i.e.* lorsque les potentiels chimiques sont égaux, il y a, au niveau de la jonction, un champ électrique,  $\vec{E}$ , dirigé du semi-conducteur vers le métal, qui s'oppose à un déplacement supplémentaire d'électrons. Toutefois, à cause de l'agitation thermique, il y a toujours un flux d'électrons passant du semi-conducteur vers le métal et vice versa mais ces flux sont égaux à l'équilibre ce qui nous fait dire, au point de vue macroscopique, qu'il n'y a pas de transfert d'électrons.

Si nous appliquons maintenant une tension positive,  $V$ , au métal par rapport au semi-conducteur, nous diminuons la hauteur de la barrière s'opposant au passage des électrons du semi-conducteur vers le métal de  $eV$  (figure 8.7 (c)). Elle devient  $\Delta W = W_m - W - eV$ . Par contre, la barrière pour les électrons qui passent du métal vers le semi-conducteur reste inchangée car il n'y a pas de chute de potentiel dans un métal. Par conséquent, le flux d'électrons passant du semi-conducteur vers le métal augmente alors que le flux inverse reste inchangé. Ce flux d'électrons du semi-conducteur vers le métal, qui se traduit par un courant allant du métal au semi-conducteur, augmente exponentiellement avec la tension appliquée. La jonction est dite polarisée dans le sens « passant ».

Si nous appliquons une tension positive,  $V$ , au semi-conducteur par rapport au métal, la barrière s'opposant aux électrons est augmentée de  $eV$  et devient  $\Delta W = W_m - W + eV$  (figure 8.7 (d)). La zone de déplétion s'élargit et le flux d'électrons passant du semi-conducteur au métal diminue fortement. Par contre, le flux d'électrons du métal vers le semi-conducteur reste inchangé. Le passage d'électrons du semi-conducteur vers le métal est pratiquement bloqué et l'on n'observe qu'un très faible courant qui sature à une valeur pratiquement indépendante de  $V$ . La jonction est dite polarisée dans le sens « bloquant ».

Avant de conclure cette section, faisons quelques comparaisons entre la jonction *pn* et la jonction Schottky :

- le courant inverse est dû aux porteurs minoritaires qui diffusent à travers la zone de déplétion dans le cas d'une jonction *pn* alors qu'il provient des porteurs majoritaires qui franchissent la barrière, en provenance du métal, dans le cas d'une jonction Schottky. Par conséquent, il en résulte une forte dépendance en température pour la jonction *pn*.

- le courant dans le sens passant provient de l'injection de porteurs minoritaires venant des zones  $p$  et  $n$  pour la jonction  $pn$  alors qu'il provient des porteurs majoritaires en provenance du semi-conducteur pour la diode Schottky.
- la tension d'opération dans le sens passant est inférieure pour une diode Schottky à celle d'une jonction  $pn$ .
- la diode Schottky commute beaucoup plus rapidement que la jonction  $pn$ .

### 8.4.2 Jonction Ohmique

Considérons un semi-conducteur de type  $n$  et plaçons-nous maintenant dans le cas où  $W_m < W$ , *i.e.* où le travail d'extraction est inférieur à celui du métal<sup>4</sup>. Au contact, les niveaux de Fermi s'égalisent et il n'y a pas de barrière empêchant les électrons de passer. Ceci permet, en principe, d'avoir un courant dans les deux directions sans avoir de perte appréciable. On qualifie pour cette raison ce type de contact de *jonction ohmique*.

Les jonctions ou contacts ohmiques sont importants dans la technologie des semi-conducteurs, notamment pour les interconnexions. Bien qu'en principe il suffise, comme nous venons de le voir, d'avoir un métal dont le travail d'extraction est inférieur à celui du semi-conducteur, la réalisation pratique de contacts purement ohmiques est difficile et demande un bon savoir faire. Dans la technologie des semi-conducteurs (micro-électronique), le métal utilisé pour faire les interconnexions est l'aluminium. Toutefois, depuis peu de temps, on sait également mettre en œuvre du cuivre. Pour réaliser un bon contact ohmique, on crée une fine zone  $n^+$ , *i.e.* fortement dopée  $n$ , au voisinage du contact métallique. Cette couche de très faible épaisseur réduit la largeur de la zone de déplétion et permet aux électrons de passer par effet tunnel.

## EXERCICES

### Exercice 8.1

Nous allons considérer une jonction  $pn$  dont l'axe de symétrie est orienté selon  $x$ . La zone de contact se trouve en  $x = 0$  et la zone  $n$  est située dans le domaine des  $x$  positifs. Nous allons déterminer la largeur de la zone de déplétion dans le cadre d'un modèle simplifié en résolvant l'équation de Poisson pour obtenir le potentiel électrique. Nous allons supposer que, dans la zone de déplétion, la concentration de porteurs libres est négligeable par rapport aux charges

4. Pour un semi-conducteur de type  $p$  on a contact ohmique lorsque  $W_m > W$ .

fixes (ions du réseaux) dont les nombres sont  $N_d$  pour les donneurs et  $N_a$  pour les accepteurs. Ceci conduit au profil de charge électrique  $\rho(x)$  suivant :

$$\begin{array}{llll} \rho(x) = 0 & \text{pour} & -\infty < x < -\ell_{p0} & (\text{zone quasi-neutre}) \quad \text{Zone I} \\ \rho(x) = -eN_a & \text{pour} & -\ell_{p0} \leq x \leq 0 & (\text{zone de déplétion}) \quad \text{Zone II} \\ \rho(x) = eN_d & \text{pour} & 0 \leq x \leq \ell_{n0} & (\text{zone de déplétion}) \quad \text{Zone III} \\ \rho(x) = 0 & \text{pour} & 0 \leq x < +\infty & (\text{zone quasi-neutre}) \quad \text{Zone IV} \end{array}$$

On suppose de plus que le champ électrique  $E(x)$  est nul dans les zones quasi-neutres.

1. Écrire l'équation de Poisson.
2. Résoudre cette équation dans les différentes zones et en déduire le champ électrique.
3. Quelle relation y-a-t-il entre  $N_a \ell_{p0}$  et  $N_d - \ell_{n0}$  ? Quelle est la signification physique de cette relation ?
4. En déduire la valeur du potentiel électrique  $\phi_0(x)$  en utilisant les conditions aux limites suivantes :  $\phi_0(-\infty) = \phi_{p0}$  et  $\phi_0(+\infty) = \phi_{n0}$ .
5. Calculer la valeur du potentiel de jonction  $\Phi_0 = \phi_{n0} - \phi_{p0}$ .
6. En utilisant les relations précédentes, donner la largeur de la zone de déplétion.
7. Comment sont modifiés les résultats précédents lorsque l'on applique une tension  $V_a$  à la jonction comptée positivement lorsque le potentiel de la zone  $p$  est supérieur à celui de la zone  $n$ .

## Exercice 8.2

On considère une jonction  $p^+n$  en silicium à 300 K. La zone  $n$  est dopée à  $10^{16}$  atomes  $\text{cm}^{-3}$  et la zone  $p$  à  $10^{18}$  atomes  $\text{cm}^{-3}$ . On supposera que le nombre de porteurs du silicium intrinsèque est  $n_i = 1,45 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  et que la constante diélectrique relative du silicium vaut  $\epsilon_r = 11,9$ .

1. Calculer la hauteur de la barrière de la jonction en l'absence de polarisation.
2. Calculer le nombre d'électrons dans la zone  $p$  et le nombre de trous dans la zone  $n$ .
3. Calculer l'épaisseur de la zone de déplétion de la région  $p$  et celle de la région  $n$  en l'absence de polarisation.
4. Que deviennent ces épaisseurs lorsque la diode est polarisée en inverse avec une tension de 5 V et lorsqu'elle est polarisée en direct avec une tension de 0,5 V ?

## Exercice 8.3

1. Calculer le potentiel d'une jonction  $p - n$  en silicium à transition abrupte telle que le dopage  $p$  soit  $n_1 = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  et le dopage  $n$  soit  $n_2 = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ .

2. Calculer l'épaisseur de déplétion.

On donne la densité de porteurs intrinsèques  $n_i = 1,4 \times 10^{10}$  et la constante diélectrique du silicium  $\epsilon_r = 11,9$ .

## CORRIGÉS

### Exercice 8.1

1. L'équation de Poisson la plus générale s'écrit dans l'espace à 1 dimension :

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = -\frac{d\vec{E}}{dx} = -\frac{q}{\epsilon_s}(N_d - N_a) \quad (8.3)$$

2. Le champ électrique est obtenu en résolvant :

si  $-l_{p0} < x < 0$ , on a :  $-\frac{d\vec{E}}{dx} = \frac{q}{\epsilon_s}N_a$  avec  $\vec{E}(-l_{p0}) = 0$

si  $0 < x < l_{n0}$ , on a :  $-\frac{d\vec{E}}{dx} = -\frac{q}{\epsilon_s}N_d$  avec  $\vec{E}(l_{n0}) = 0$

d'où :

pour  $-l_{p0} < x < 0$ , on a :  $\vec{E}(x) = -\frac{q}{\epsilon_s}N_a(x + l_{p0})$

pour  $0 < x < l_{n0}$ , on a :  $\vec{E}(x) = -\frac{q}{\epsilon_s}N_d(l_{n0} - x)$

3. Le champ électrique est continu en  $x = 0$ , d'où :

$$-\frac{q}{\epsilon_s}N_al_{p0} = -\frac{q}{\epsilon_s}N_dl_{n0} \implies N_al_{p0} = N_dl_{n0} \quad (8.4)$$

qui traduit la neutralité électrique du système.

4. Le potentiel  $\Phi(x)$  est obtenu en intégrant une deuxième fois l'équation de Poisson 8.3, soit :

si  $-l_{p0} < x < 0$ , on a :  $-\frac{d\Phi}{dx} = -\vec{E}(x) = \frac{q}{\epsilon_s}N_a(x + l_{p0})$

si  $0 < x < l_{n0}$ , on a :  $-\frac{d\Phi}{dx} = -\vec{E}(x) = \frac{q}{\epsilon_s}N_d(l_{n0} - x)$

avec par continuité :

$$\Phi(-l_{p0}) = \Phi_{p0} \text{ et } \Phi(l_{n0}) = \Phi_{n0}$$

Pour  $-l_{p0} < x < 0$ , on a :  $\Phi(x) = \frac{q}{2\epsilon_s}N_a(x + l_{p0})^2 + \Phi_{p0}$

Pour  $0 < x < l_{n0}$ , on a :  $\Phi(x) = \Phi_{n0} - \frac{q}{2\epsilon_s}N_d(l_{n0} - x)^2$

5. Le potentiel est continu en  $x = 0$  dans la jonction, d'où :

$$\frac{q}{2\epsilon_s}N_al_{p0}^2 + \Phi_{p0} = \Phi_{n0} - \frac{q}{2\epsilon_s}N_dl_{n0}^2$$

$$\Phi_0 = \Phi_{n0} - \Phi_{p0} = \frac{q}{2\epsilon_s}(N_al_{p0}^2 + N_dl_{n0}^2)$$

6. On appelle  $\Phi_0$  le potentiel de jonction ou potentiel de contact. L'équation 8.4 permet de calculer  $l_{p0}$  et  $l_{n0}$  en fonction de  $q$ ,  $\epsilon_s$ ,  $N_a$ ,  $N_d$  et  $\Phi_0$ . On obtient les équations 8.2. La largeur totale de la zone de déplétion s'en déduit :

$$l_{p0} + l_{n0} = \sqrt{\frac{2\epsilon_s}{q} \Phi_0 \frac{(N_a + N_d)}{N_a N_d}}$$

7. Si l'on polarise la jonction sous la tension  $V_a > 0$ , le potentiel de jonction  $\Phi_0$  devient  $\Phi = \Phi_0 - V_a$ . La longueur de la zone de déplétion devient :

$$l_p + l_n = \sqrt{\frac{2\epsilon_s}{q} (\Phi_0 - V_a) \frac{(N_a + N_d)}{N_a N_d}}$$

Donc pour  $V_a > 0$ , on observe une diminution de la zone de déplétion et du potentiel total.

## Exercice 8.2

1. La hauteur de la barrière en l'absence de polarisation vaut :

$$eV_0 = k_B T \text{Log} \left( \frac{N_a N_d}{n_i^2} \right) = 0,819 \text{ eV}$$

2. Appliquons la loi de masse pour calculer la concentration des trous dans la zone  $n$ . On a  $n_e^{(n)} n_h^{(n)} = n_i^2$ . Les donneurs sont complètement ionisés, donc  $n_e^{(n)} = N_d = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . On trouve  $n_h^{(n)} = \frac{n_i^2}{N_d} = 2,1 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ . Pour la zone  $p$  on a  $n_h^{(p)} = N_a = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Par conséquent  $n_e^{(p)} = \frac{n_i^2}{N_a} = 2,1 \times 10^2 \text{ cm}^{-3}$ .

3. On calcule la largeur des zones de déplétion dans les différentes régions en utilisant les équations (8.2). On trouve pour la zone de déplétion de la région  $p$  :

$$\ell_p = \sqrt{\frac{2 \times 11,9 \times 8,854 \times 10^{-12}}{1,6 \times 10^{-19}} 0,819 \frac{10^{22}}{10^{24} \times (10^{22} + 10^{24})}} = 3,27 \times 10^{-9} \text{ m}$$

On notera que  $10^{16} \text{ cm}^{-3} = 10^{22} \text{ m}^{-3}$ . Ainsi,  $\ell_p = 32,7 \text{ \AA}$ . On trouverait de même  $\ell_n = 0,33 \text{ }\mu\text{m}$ .

4. Pour  $V_a = 5 \text{ V}$  en inverse, la barrière devient égale à  $V_0 + V_a = 5,819 \text{ V}$ . En utilisant les mêmes formules, on obtient  $\ell_p = 32,7 \times \sqrt{\frac{5,819}{0,819}} = 87,1 \text{ \AA}$  et  $\ell_n = 0,87 \text{ }\mu\text{m}$ .

Pour une tension de  $0,5 \text{ V}$  dans le sens passant, on a  $\ell_p = 32,7 \times \sqrt{\frac{0,319}{0,819}} = 20,4 \text{ \AA}$  et  $\ell_n = 0,2 \text{ }\mu\text{m}$ .

---

**Exercice 8.3**

1. On a  $V = \frac{k_B T}{e} \text{Log} \frac{n_1 n_2}{n_i} = 0,0259 \text{ Log} \frac{10^{17} 10^{15}}{(1,4 \times 10^{10})^2} = 0,7 \text{ V}.$

2.  $\Delta e = \sqrt{\frac{2\epsilon_r(n_1+n_2)V}{en_1n_2}} = 0,965 \mu\text{m}$



## Chapitre 9

---

# Dispositifs élémentaires (II)

Nous allons maintenant utiliser les notions introduites dans le chapitre 8 pour comprendre le fonctionnement de dispositifs un peu plus élaborés qui sont les composants élémentaires de systèmes électroniques plus complexes.

### 9.1 LE TRANSISTOR BIPOLAIRE

Un transistor bipolaire est un dispositif constitué de 3 zones différemment dopées d'un même cristal qui forment deux jonctions  $pn$  montées en opposition avec une zone commune. On a deux familles de transistors :  $pnp$  et  $nnp$ . Les 3 zones sont appelées *émetteur*, *base* et *collecteur*. Le transistor bipolaire est caractérisé par le fait que l'épaisseur de la base est très faible (typiquement de l'ordre du  $\mu m$ , *i.e.* très inférieure à la longueur de diffusion des porteurs minoritaires) ce qui permet un fort couplage entre la jonction constituée de l'émetteur-base et celle de la base-collecteur. Il y a 3 accès électriques à un transistor bipolaire qui permettent de moduler les paramètres électriques de l'émetteur, de la base et du collecteur. Dans un transistor bipolaire, le courant principal circule entre l'émetteur et le collecteur. Il entre par l'émetteur pour un transistor  $pnp$  ou il en sort dans le cas d'un dispositif  $nnp$ . L'électrode de base permet de commander ce courant principal avec un courant beaucoup plus faible (typiquement cent fois plus faible que le courant principal) : c'est l'*effet transistor*. Ce dernier permet de moduler le courant inverse de la jonction base-collecteur, polarisée en inverse, en injectant dans la base à partir de la jonction émetteur-base polarisée dans le sens direct.

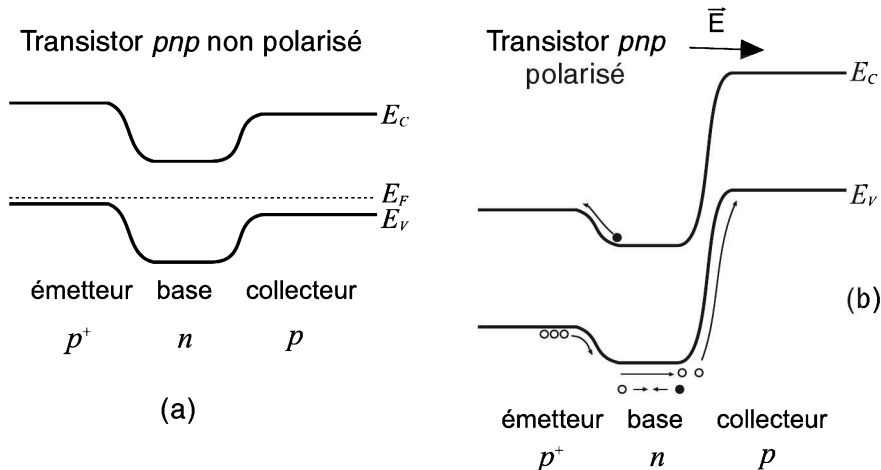


### 9.1.1 Principe du transistor *pnp*

Dans cette section, nous allons nous limiter au transistor bipolaire de type *pnp* et présenter les phénomènes physiques qui sont responsables des caractéristiques particulières de ce dispositif. Un transistor de type *nnp* a un fonctionnement analogue avec des polarités et des flux de courant inversés. Nous supposons que ce transistor est utilisé en mode dit *actif*, *i.e.* que les jonctions *pn* et *np* sont respectivement polarisées en direct et en inverse.

Un transistor bipolaire de type *pnp* est constitué d'une zone  $p^+$  fortement dopée, qui est l'émetteur, d'une zone dopée *n* qui est la base et d'une zone faiblement dopée *p* qui est le collecteur.

Considérons tout d'abord la jonction émetteur–base  $p^+n$  et supposons qu'elle soit polarisée en direct. Le nombre d'atomes accepteurs de la zone  $p^+$  est beaucoup plus grand que le nombre de donneurs de la zone *n*. Par conséquent, à l'équilibre, la loi d'action de masse implique que, dans la zone désertée, le nombre de trous minoritaires de la zone *n* est bien supérieur au nombre d'électrons minoritaires de la zone *p*. Ceci signifie que le courant est majoritairement porté par les trous. De plus, comme nous l'avons vu dans la section 8.1.2, la largeur de la zone désertée est essentiellement donnée par celle de la région *n*. Par conséquent, la jonction  $p^+n$  polarisée en direct permet d'injecter des trous de la zone  $p^+$  vers la zone *n*. En l'absence de polarisation, le diagramme de bande est schématiquement indiqué dans la figure 9.1 (a).



**Figure 9.1** (a) Diagramme de bande d'un transistor *pnp* en l'absence de polarisation. (b) Diagramme de bandes pour le transistor *pnp* polarisé en mode actif. Les électrons sont représentés par des cercles pleins et les trous par des cercles vides.

Considérons maintenant le transistor  $p^+np$  en régime actif. La jonction émetteur-base est polarisée en direct et la jonction base-collecteur en inverse. Compte tenu de l'effet d'un potentiel extérieur sur une jonction  $pn$ , la hauteur de la barrière est diminuée dans le premier cas alors qu'elle est augmentée dans le second (figure 9.1). Regardons à présent le flux des porteurs de charge. Nous avons :

- des trous qui sont injectés de l'émetteur vers la base.
- ces trous diffusent, pour leur grande majorité, vers le collecteur car l'épaisseur de la base est très faible comparée à leur longueur de diffusion. Le champ électrique dans la zone désertée base-collecteur les entraîne vers le collecteur.
- une faible proportion des trous passant dans la base se recombine avec les électrons qui sont majoritaires dans cette zone.
- des électrons, fournis par le circuit externe de polarisation de la base, compensent les électrons qui se sont recombinés avec les trous en provenance de l'émetteur.
- quelques uns des électrons injectés dans la base vont diffuser vers l'émetteur. Ils sont aussitôt remplacés par des électrons provenant du circuit externe.
- il y a un faible courant inverse dans la jonction base-collecteur. Il est dû aux porteurs de charge générés par excitation thermique (électrons minoritaires de  $p$  vers  $n$  et trous minoritaires de  $n$  vers  $p$ ).

Faisons maintenant le bilan des courants électriques qui circulent dans les connexions aux trois régions du transistor  $pnp$  en tenant compte de ce que le courant a le même sens que celui des porteurs de charge positifs, donc le sens contraire de celui du mouvement des électrons. Nous avons :

- le courant  $I_E$  qui circule dans l'émetteur est la somme de deux contributions : celle des trous,  $I_E^{(h)}$ , qui vont de l'émetteur à la base, et celle des électrons,  $I_E^{(e)}$ , qui vont de la base vers l'émetteur ;
- le courant  $I_B$  qui sort de la base et qui provient des électrons injectés ;
- enfin le courant  $I_C$  qui sort du collecteur et qui vient principalement des trous provenant de l'émetteur.

### 9.1.2 Amplification

En électronique, un dispositif amplificateur permet d'augmenter l'amplitude d'un signal. Ainsi, un courant est amplifié lorsque sa valeur de sortie est supérieure à sa valeur d'entrée. Ceci ne se fait pas sans apport d'énergie extérieure. Il faut un dispositif qui puisse fournir de l'énergie ; c'est l'alimentation extérieure du dispositif amplificateur. Le courant de sortie peut être modulé soit par un courant, comme nous allons le voir pour un transistor bipolaire, soit par une tension comme c'est le cas des transistors à effet de champ que nous étudierons plus loin.

Le transistor bipolaire fonctionne, en mode actif, comme un amplificateur dans lequel un faible courant de base  $I_B$  contrôle un grand courant sur le collecteur  $I_C$ . Le courant  $I_C$  provient essentiellement du courant de trous. Le courant de base correspond à des électrons qui sont injectés dans la base. L'origine du processus d'amplification provient de ce que la neutralité électrique dans la base doit être préservée. Par conséquent, une augmentation du courant de base, *i.e.* une injection plus importante d'électrons doit être immédiatement compensée par un flux plus important de trous en provenance de l'émetteur afin d'assurer cette neutralité électrique. Le courant  $I_C$  peut donc être modulé par le courant  $I_B$ . Pour qu'il y ait amplification, *i.e.* gain, il faut qu'un électron injecté puisse contrôler plus d'un trou en provenance de l'émetteur. Ceci s'avère possible si la durée de vie de l'électron dans la base est supérieure au temps de transit des trous dans celle-ci. Ceci explique la nécessité d'avoir une base très fine. Le gain est grossièrement égal au rapport entre le temps de vie de l'électron et le temps de transit des trous dans la base.

### 9.1.3 Gain

Le courant de l'émetteur,  $I_E$ , provient de deux contributions : une associée aux trous,  $I_E^{(h)}$ , qui vont de l'émetteur à la base ; l'autre en provenance des électrons de la base,  $I_E^{(e)}$  ; donc  $I_E = I_E^{(h)} + I_E^{(e)}$ .

Le courant du collecteur,  $I_C$ , est la partie du courant de l'émetteur provenant des trous qui ont pu franchir la base sans se recombiner avec des électrons. On a  $I_C = \alpha_T I_E^{(h)}$  où  $\alpha_T$  est le facteur de transport de la base. Nous avons négligé, dans cette évaluation, le courant de génération dû aux porteurs de charge minoritaires. L'efficacité de l'injection des trous est définie par le rapport :

$$\gamma = I_E^{(h)} / I_E = I_E^{(h)} / (I_E^{(h)} + I_E^{(e)}) .$$

Si aucun électron n'est injecté dans la base,  $\gamma = 1$  : le courant injecté par l'émetteur est entièrement composé de trous. Le courant de base,  $I_B$ , provient des électrons qui passent de la base vers l'émetteur,  $I_E^{(e)}$ , et du courant d'électrons nécessaire pour compenser ceux qui se sont recombinés avec les trous dans la base. Ce dernier vaut  $(1 - \alpha_T) I_E^{(h)}$ . C'est, en effet, la part du courant  $I_E^{(h)}$  qui n'arrive pas au collecteur. Donc,  $I_B = I_E^{(e)} + (1 - \alpha_T) I_E^{(h)}$ .

Le gain en courant d'un transistor monté en base commune,  $\beta$ , est défini comme :

$$\beta = I_C / I_B = \alpha_T I_E^{(h)} / (I_E^{(e)} + (1 - \alpha_T) I_E^{(h)}) ,$$

soit  $\beta = \alpha_T \gamma (1 - \alpha_T \gamma)$ . Les quantités  $\alpha_T$  et  $\gamma$  sont inférieures à 1. Si le produit est proche de l'unité, le gain peut être élevé. Il vaut 1 pour  $\alpha_T \gamma = 0,5$ . Pour un transistor typique, on a  $\beta \approx 100$ .

## 9.2 LA DIODE TUNNEL

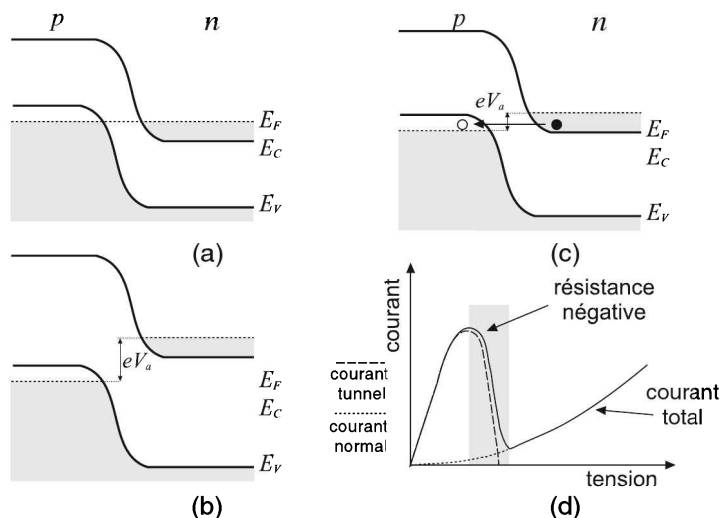
La diode tunnel est une jonction  $pn$  particulière qui présente, dans certaines conditions, une conductivité différentielle négative. Cela signifie que le courant circulant dans ce composant peut diminuer lorsque la tension augmente.

Le niveau de Fermi d'un semi-conducteur de type  $n$  est donné par l'expression (6.24). Nous avons une formule analogue pour un semi-conducteur de type  $p$  (équation (6.25)). Pour des dopages très élevés, le niveau de Fermi  $E_F^{(n)}$  d'un semi-conducteur de type  $n$  peut passer au-dessus de  $E_C$ , le minimum de la bande de conduction. De même, pour un semi-conducteur de type  $p$ , le niveau de Fermi peut être situé dans la bande de valence ( $E_F^{(p)} < E_V$ ).

Une diode tunnel est un dispositif quantique composé d'une jonction  $pn$  constituée de semi-conducteurs fortement dopés ( $N_a, N_d \gg 1$ ). Le niveau de Fermi de la zone quasi-neutre de type  $n$  est dans la bande de conduction et celui de la zone quasi-neutre de type  $p$ , dans la bande de valence. La hauteur de la barrière de la jonction est également très grande mais sa largeur est très faible, typiquement inférieure à  $\simeq 10$  nm. Ceci conduit, en l'absence de polarisation, au schéma de la figure 9.2 (a). Si nous appliquons à la jonction  $pn$  une tension  $V_a$  dans le sens passant, nous voyons progressivement augmenter le courant dans la diode pour atteindre un maximum (figures 9.2 (b) et 9.2 (d)). Ce courant résulte d'un phénomène quantique : le passage par effet tunnel des électrons de conduction du semi-conducteur  $n$  vers le haut de la bande de valence inoccupée du semi-conducteur  $p$ . Ce phénomène se fait sans variation d'énergie et n'est possible que s'il existe, dans le semi-conducteur de type  $p$ , des états vides de même énergie que les états occupés du semi-conducteur  $n$ . Il faut de plus que l'épaisseur de la barrière soit très faible sinon la probabilité de passage par effet tunnel est trop petite. Ces conditions sont remplies dans la diode tunnel.

Lorsque l'on augmente la tension appliquée, dans le sens passant à partir de zéro, le nombre d'états vides au sommet de la bande de valence du semi-conducteur  $p$ , de même énergie que les états occupés au bas de la bande de conduction du semi-conducteur  $n$ , augmente. Le courant tunnel croît jusqu'à une valeur maximum correspondant à la configuration de la figure 9.2 (c). Il diminue ensuite, car moins d'états satisfont à cette condition, et s'annule pour la configuration (b) de la figure 9.2 pour laquelle il n'y a plus d'états vides du semi-conducteur  $p$  ayant la même énergie que les états occupés du semi-conducteur  $n$ . Le courant normal de la jonction  $pn$  se superpose à ce phénomène d'effet tunnel.

Regardons à présent la caractéristique courant-tension de la diode présentée dans la figure 9.2 (d). La résistance de ce dispositif est définie comme  $R = dV/dI$ , où  $V$  est la tension et  $I$  le courant. Elle est négative dans la partie grisée. C'est une propriété remarquable de la diode tunnel qui est exploitée dans certains dispositifs électroniques tels que les oscillateurs haute fréquence.



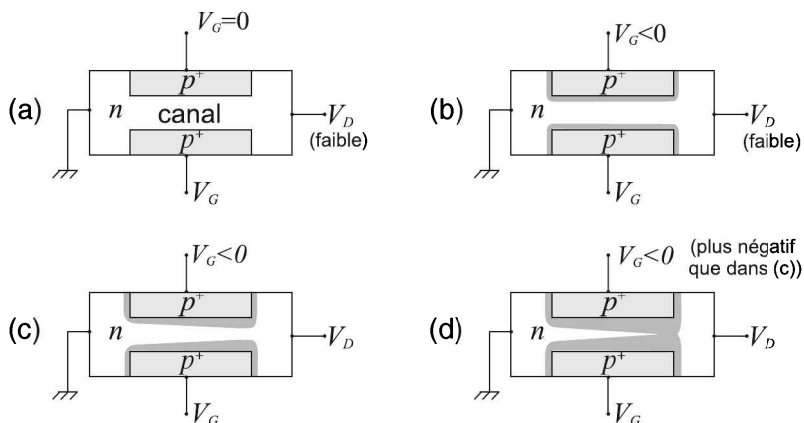
**Figure 9.2** Diagramme de bandes d'une diode tunnel pour une tension appliquée nulle (a), pour un courant tunnel maximum (b) et pour la configuration pour laquelle le courant tunnel va disparaître (c). Le grisé représente les états occupés. (d) représente la caractéristique de la diode pour une polarisation dans le sens passant. Le grisé représente la zone de résistance négative.

### 9.3 TRANSISTORS À EFFET DE CHAMP

Le transistor à effet de champ, dénommé FET (field effect transistor), est un composant très important qui a de multiples applications en électronique. Les circuits intégrés, qui sont maintenant de plus en plus utilisés dans le domaine du traitement de l'information, y font largement appel. Le FET est un dispositif unipolaire en ce sens que son fonctionnement dépend d'un seul type de porteur de charges : électrons ou trous. Rappelons à ce propos que le transistor bipolaire est, comme son nom l'indique, un dispositif dans lequel les deux types de porteurs de charge, électrons et trous, interviennent. L'intérêt d'un dispositif unipolaire provient de ce qu'il n'y a pas de limitation provenant des recombinaisons de paires électrons-trous ce qui en fait un composant très rapide. Par ailleurs, les FET ont, à haute fréquence, de bien meilleures performances que les transistors bipolaires.

Le transistor à effet de champ est un dispositif à 3 électrodes : la *source*, le *drain* et la *grille*. Les porteurs de charge, électrons ou trous circulent de la source au drain (l'entrée et la sortie), dans un *canal* (figure 9.3 (a)). Le débit de ce canal est commandé par la troisième électrode, la grille, qui fait varier la largeur du canal. On a donc un dispositif analogue à un tuyau dans lequel circule de l'eau dont on contrôle le débit avec un robinet qui est pour, le FET, la grille. Toute modulation de la tension de grille conduit à une modulation de la largeur du canal et à une modulation du courant de sortie. Cette analogie hydraulique est illustrée sur la figure 9.4. Sur cette figure, nous montrons l'analogie hydraulique du transistor bipolaire dans laquelle le contrôle de

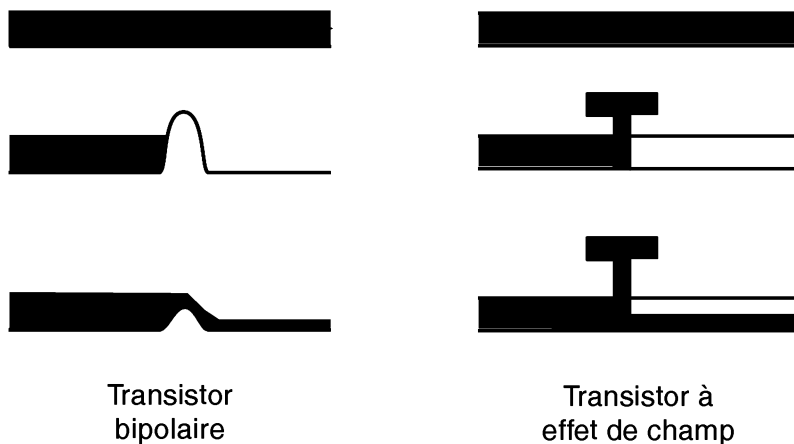
l'eau s'écoulant sur une surface se fait par un barrage (courant de base du transistor bipolaire) de hauteur plus ou moins grande.



**Figure 9.3** (a) Schéma de principe du JFET. Dans la pratique, une diffusion  $n^+$  fortement dopée est réalisée au voisinage de la source et du drain pour assurer un contact ohmique. La zone  $p^+$  est une zone  $p$  fortement dopée.

(b) Pour une faible tension de grille, la zone de déplétion est indiquée en grisé. (c) Lorsque la grille est polarisée, la zone de déplétion s'élargit et devient asymétrique. (d) Lorsque la tension de grille devient suffisante, le canal se pince (pinch off).

#### Analogie hydraulique



**Figure 9.4** Analogie hydraulique du transistor bipolaire et du FET.

Du point de vue pratique, on peut classer les transistors à effet de champ en deux familles selon qu'ils conduisent ou ne conduisent pas au repos, *i.e.* en l'absence de polarisation de grille.

- La première est constituée par les *FET à désertion* pour lesquels le canal est conducteur en l'absence de polarisation. Une polarisation convenable de la grille permet de pincer celle-ci en augmentant la résistance entre la source et le drain.
- La deuxième famille est constituée des *FET à enrichissement* pour lesquels le canal est isolant en l'absence de polarisation. Une polarisation convenable de la grille ouvre le canal et permet la circulation du courant entre la source et le drain.

Un transistor à effet de champ doit avoir une grille très bien isolée électriquement des électrons du canal. Selon la nature de l'isolant utilisé, on a différents types de transistors à effet de champ. Citons quelques exemples :

- pour les FET en silicium, si l'on utilise comme isolant de l'oxyde de silicium,  $\text{SiO}_2$ , le transistor porte le nom de MOSFET (metal–oxid–semiconductor FET). Les IGFET (insulated gate FET) appartiennent à cette catégorie.
- l'isolation électrique de la grille peut être faite à l'aide d'une jonction polarisée en inverse. Si la jonction est de type *pn* on parle de JFET (jonction FET). On peut aussi utiliser une jonction de type Schottky et l'on parle alors de MESFET (metal–semiconductor FET).

Nous allons maintenant étudier quelques transistors à effet de champ dans lesquels l'isolement de la grille est fait par une jonction polarisée en inverse.

### 9.3.1 Le JFET

Le JFET (Junction Field-effect transistor) est un transistor à jonction et à effet de champ. C'est un dispositif dont on peut contrôler le courant à l'aide d'une tension. Pour cette raison, on dit que c'est un amplificateur contrôlé par une tension. Une coupe du schéma de principe est indiquée sur la figure 9.3 (a). Dans l'exemple présenté de type FET à désertion, un barreau résistif de semi-conducteur de type *n* est pris entre deux morceaux de semi-conducteur de type *p* fortement dopés (dénommés pour cette raison  $p^+$ ). Le côté gauche du barreau est appelé la *source* et le côté droit le *drain*. La *source* est reliée à la masse et le *drain* est porté à un potentiel positif  $V_D$  par rapport à la source ( $V_D > 0$ ). En fait, au voisinage de la source et du drain le dopage est  $n^+$  pour avoir des contacts ohmiques. Les deux morceaux de semi-conducteur de type  $p^+$  constituent ce que l'on dénomme la *grille*. La grille est polarisée négativement par rapport à la source. Son potentiel  $V_G$  est tel que  $V_G \leq 0$  si bien que les jonctions *pn* (grille–source et grille–drain) sont bloquées et seul un courant très faible, dû aux porteurs minoritaires, circule. La zone conductrice du semi-conducteur *n* située entre la source et le drain s'appelle le *canal*.

Le JFET est un composant dont le courant peut être contrôlé par une tension. Il peut être utilisé pour cela comme amplificateur. Le principe de base est de faire varier l'extension spatiale de la zone de déplétion, en faisant varier  $V_G$ , de façon à contrôler

l'intensité du courant qui circule entre la source et le drain, un peu comme le robinet de la figure 9.4 contrôle le débit d'eau du tuyau.

Un courant circule entre la source et le drain qui sont portés à des potentiels électriques différents. Son intensité dépend de la tension de grille comme nous allons le voir dans le raisonnement qualitatif suivant.

Lorsque la tension de drain est faible et que  $V_G = 0$ , on a, entre la source et le drain, un simple barreau résistif. On peut calculer l'intensité du courant en appliquant la loi d'Ohm. Ce courant est appelé *courant de drain*. Dans ce cas, la relation entre l'intensité du courant et la tension de drain est linéaire. Une diminution de la tension de grille  $V_G$  a pour effet d'augmenter la largeur de la zone de déplétion et, par conséquent, de diminuer celle du canal. Si la tension de grille est suffisamment négative, il y a pincement du canal et aucun courant ne circule plus entre la source et le drain. La zone de déplétion, représentée en grisé dans la figure 9.3 (b), s'élargit donc progressivement, lorsque  $|V_G|$  augmente, jusqu'à fermer le canal.

Considérons maintenant une tension de drain,  $V_D$ , plus élevée (figures 9.3 (c) et (d)). Le matériau semi-conducteur  $n$  étant résistif, le potentiel électrique chute entre le drain et la source puisque l'on passe de la valeur  $V_D$  à la valeur 0. Le potentiel,  $V$ , dépend donc de l'abscisse, ce qui signifie aussi que la tension de polarisation appliquée aux bornes des jonctions  $pn$  dépend de la position. La zone de déplétion est plus large à droite qu'à gauche (figure 9.3 (c)).

Lorsque les deux zones de déplétion se rejoignent (figure 9.3 (d)), aucun courant ne peut plus circuler entre la source et le drain. Ceci se produit au delà d'une *tension de seuil*, appelée tension de saturation de drain, pour laquelle il y a fusion des deux morceaux des zones de déplétion qui sont les plus proches du drain. On dit qu'il y a *pincement du canal  $n$* . Le pincement du canal n'empêche pas les électrons de passer de la source au drain tant que l'épaisseur de cette zone désertée est faible. En effet, à cause du champ électrique intense dans le sens longitudinal, les électrons provenant de la source peuvent traverser la zone de déplétion. Toutefois, ce flux d'électrons est limité car la tension au point de pincement est fixe. Ceci se traduit par un courant de saturation.

Dans un JFET, le signal à amplifier est appliqué à la grille. Le courant de grille étant nul, au courant de fuite des jonctions près, le JFET présente une très grande impédance d'entrée qui est utilisée, par exemple, dans la réalisation d'étages d'entrée d'amplificateurs à haute sensibilité. Cette grande impédance d'entrée est une propriété spécifique du JFET qui le différencie du transistor bipolaire. Elle est d'autant plus importante que le courant grille-canal est faible, *i.e.* que la densité de porteurs minoritaires est faible. C'est la raison pour laquelle la grille est fortement dopée  $p^+$ .



### 9.3.2 Le MESFET

Le MESFET (metal semiconductor FET) ressemble beaucoup au JFET décrit dans la section 9.3.1. On le réalise à partir de l'arséniure de gallium (*AsGa*) ou de l'*InP* pour faire des dispositifs fonctionnant à très haute fréquence (jusqu'à 100 GHz). Dans le MESFET, la diode *pn* du JFET est remplacée par une diode Schottky plus rapide et permettant d'aller à de très hautes fréquences.

Un schéma typique de MESFET, de type FET à désertion, est représenté dans la figure 9.5. Le point de départ est un substrat d'*AsGa* sur lequel est déposé une fine couche d'*AsGa* dopé *n*. La grille est maintenant constituée d'un métal. L'association métal-*AsGa* dopé réalise une jonction Schottky.

L'*AsGa* ayant un gap de 1,42 eV, le substrat se comporte pratiquement comme un isolant. Comme pour le JFET, la source est à la masse et le drain à un potentiel positif  $V_D > 0$ . La grille est portée à un potentiel négatif  $V_G < 0$ , ce qui polarise la diode Schottky en inverse (cf. section 8.4.1). La variation de  $V_G$  module l'extension de la zone de déplétion ainsi que la largeur du canal *n*.

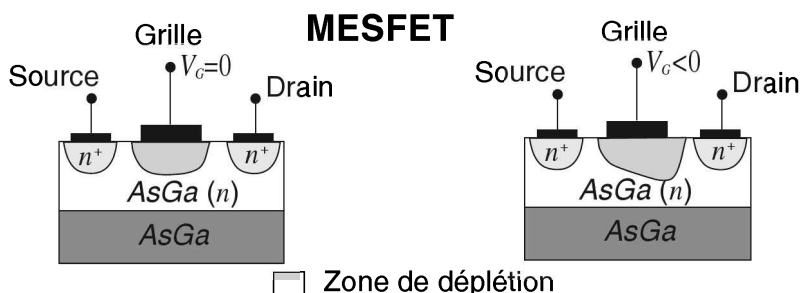


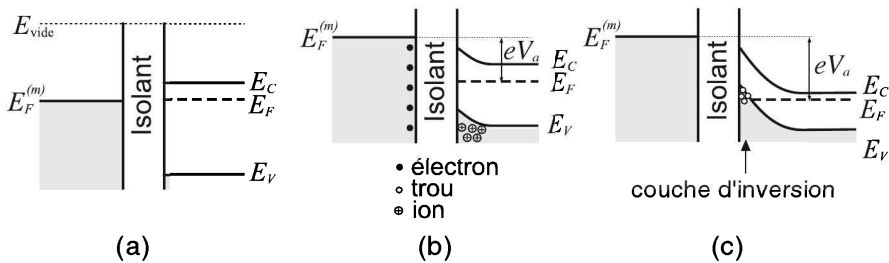
Figure 9.5 Schéma de principe d'un MESFET *AsGa*.

## 9.4 STRUCTURES MIS ET MOS

La structure MIS qui est composée d'un métal, d'un isolant et d'un semi-conducteur (MIS= metal-insulator-semiconductor), entre dans la réalisation de la plupart des composants de l'électronique moderne. Cette structure est en particulier utilisée dans la réalisation de circuits intégrés, de mémoires dynamiques, de CCD (coupled charged device) utilisés dans les caméras vidéo, etc.. C'est donc le dispositif de base de l'électronique VLSI (very large scale integration), i.e. très intégrée. Pour la technologie silicium, l'isolant choisi est son oxyde car il a d'excellentes propriétés d'interfaces et la structure MIS est alors appelée MOS (metal-oxyde-semiconductor).

Pour comprendre la physique de cette structure, nous allons considérer l'exemple académique dans lequel la jonction MIS est constituée d'un métal et d'un semi-conducteur de type *n* qui ont le même potentiel d'extraction (figure 9.6 (a)). La

couche isolante est située entre la couche métallique et celle de semi-conducteur. Nous négligerons, pour simplifier, tout effet de surface et nous supposons l'isolant parfait. Comme  $W_m = W$ , les niveaux de Fermi du métal et du semi-conducteur sont égaux ; pour une jonction MIS isolée, il ne se passe donc rien. Appliquons maintenant une tension  $-V_a$  à la structure MIS. La tension est comptée positivement lorsque le potentiel électrique du métal est supérieur à celui du semi-conducteur. Si le métal est à la masse, le potentiel du semi-conducteur est égal à  $+V_a$ . Comme la charge de l'électron est négative, le niveau de Fermi ainsi que l'ensemble des bandes du semi-conducteur sont décalés vers le bas d'une quantité  $eV_a$  (figure 9.6 (b)). Il ne se passe rien dans l'isolant car il n'y a pas de porteurs de charge libres.



**Figure 9.6** Schéma de bandes de la structure MIS en l'absence de tension appliquée (a), lorsqu'une tension  $V_a$  est appliquée (b), lorsqu'il y a inversion (c).

La tension appliquée  $V_a$  signifie qu'il y a un champ électrique  $\vec{E}_a$  dirigé du semi-conducteur vers le métal. Ce champ électrique repousse les électrons voisins de l'interface semi-conducteur–isolant. Il se crée donc une zone de déplétion chargée positivement puisque les ions donneurs restent liés au réseau. Bien qu'aucun courant ne circule dans l'isolant, des charges peuvent circuler dans le circuit qui applique la tension  $-V_a$  au dispositif. Par conséquent, ces électrons qui s'éloignent de l'interface, vont s'accumuler sur la surface du métal en contact avec l'isolant. On a donc la structure d'un condensateur avec son diélectrique (l'isolant) et des deux électrodes (le métal et le semi-conducteur).

Comme les électrons sont repoussés au voisinage de l'interface isolant–semi-conducteur, cela signifie que leur énergie potentielle est plus élevée que dans le volume du semi-conducteur de type  $n$ . Il y a donc une courbure des bandes d'énergie vers le haut lorsque, partant du volume du semi-conducteur  $n$ , on se rapproche de l'interface isolant–semi-conducteur.

Lorsque la tension appliquée  $-V_a$  augmente, la largeur de la zone de déplétion située dans le semi-conducteur augmente. En conséquence, les bandes se courbent de plus en plus vers le haut. Au delà d'une certaine valeur de  $V_a$ , le bord du haut de la bande de valence peut éventuellement passer au-dessus de l'énergie de Fermi. Dans ce cas, il peut se former, tout près de l'interface, une région dans laquelle les trous

minoritaires s'accumulent (figure 9.6 (c)). On dénomme une telle région une *zone d'inversion*, car c'est une zone  $p$  dans la zone  $n$ . Pour que cela soit possible, il faut que les trous minoritaires soient suffisamment nombreux. Cette zone d'inversion est conductrice car il y a des trous alors que la couche de déplétion l'est beaucoup moins puisque le nombre de porteurs de charge est très petit.

Appliquons maintenant ce raisonnement à une structure MOS constituée d'un métal (aluminium), d'oxyde de silicium ( $E_g \approx 10$  eV) et de silicium dopé  $p^1$ . Cette structure se comporte comme une capacité avec  $SiO_2$  comme isolant et des électrodes formées par le métal et le semi-conducteur. Appliquons une tension  $V_a$  à la structure avec la convention qu'elle est positive lorsque le métal est à un potentiel supérieur à celui du semi-conducteur. Si le métal est à la masse, le potentiel du semi-conducteur est  $-V_a$ . Au voisinage de l'interface semi-conducteur-isolant, les bandes sont courbées vers le bas. Le champ électrique, qui va du métal au semi-conducteur, repousse les trous situés au voisinage de l'interface semi-conducteur-isolant et crée une zone de déplétion chargée négativement mais contenant peu de porteurs de charges. Si l'on augmente la tension appliquée nous avons, comme pour la structure MIS décrite ci-dessus, l'apparition d'une zone d'inversion contenant des électrons minoritaires. Cela se produit lorsque la bande de conduction, près de l'interface, devient proche de l'énergie de Fermi. La densité d'électrons, dans la région proche de l'interface, augmente suffisamment pour que le semi-conducteur se comporte comme un semi-conducteur dopé  $n$ . Toutefois, contrairement à un dopage classique, cette zone d'inversion, qui est de type  $n$ , provient de la courbure des bandes d'énergie par une tension extérieure. Une zone d'inversion présente de nombreux avantages par rapport au dopage conventionnel car elle évite, en particulier, les collisions dues aux dopants.

## 9.5 LE TRANSISTOR MOS

Le transistor MOS est un des dispositifs les plus utilisés en micro-électronique. Avec les technologies actuelles, on peut maintenant réaliser de nombreux transistors MOS sur un substrat de silicium ; c'est la base de fabrication des circuits intégrés dans lesquels ils interviennent en très grand nombre. Il existe deux types de transistors MOS : les transistors à canal  $n$  où les porteurs de charge sont les électrons et les transistors MOS canal  $p$  pour lesquels le transport des charges se fait par les trous. Si un circuit intégré n'utilise que des transistors canal  $n$ , on dit que la technologie est  $n$ MOS, s'il n'utilise que des transistors canal  $p$ , on dit qu'elle est  $p$ MOS. La technologie la plus utilisée à l'heure actuelle utilise des transistors MOS des deux

---

1. Pour une structure MOS réalisée avec un semi-conducteur de type  $n$ , nous aurions le même schéma que celui que nous venons de présenter pour la structure MIS. Une structure MIS de type  $p$  serait, de même, analogue à la structure MOS que nous allons présenter.

types. On l'appelle pour cette raison technologie CMOS (complementary MOS). Son intérêt est de réduire de manière appréciable la puissance consommée lorsque les transistors de différents types sont convenablement associés.

L'accroissement spectaculaire des performances des circuits intégrés CMOS a été soulignée dans l'avant-propos et nous n'y reviendrons pas. L'évolution de la micro-électronique vers des intégrations plus grandes pose un grand nombre de problèmes technologiques ; la lithographie<sup>2</sup> en est un. Il en existe d'autres comme, par exemple, la nécessité d'évacuer la chaleur produite en fonctionnement afin que le circuit ne soit pas détruit si la température devient trop élevée. En effet, bien qu'un circuit intégré réalisé avec une gravure plus fine consomme moins d'énergie que s'il est fabriqué avec des détails plus gros, la grande densité de composants conduit à une densité de chaleur de plus en plus considérable qu'il faut évacuer. Il existe d'autres problèmes comme celui des interconnexions métalliques. Actuellement, il y a deux ou trois couches d'interconnexions pour les mémoires DRAM mais il y en a cinq ou plus pour les microprocesseurs. Plus les interconnexions deviennent de petites dimensions, plus la dissipation augmente.

Jusqu'à présent l'objectif de la micro-électronique a été de diminuer le prix de chaque transistor. Pour cela on travaille sur des tranches de silicium de plus en plus grandes et l'on intègre de plus en plus de transistors par unité de surface. Le coût des usines de fabrication devient maintenant colossal et seul un petit nombre d'acteurs au niveau mondial peuvent rester dans la course. Nous allons peut-être atteindre un moment où le retour sur investissement ne justifiera pas d'aller plus loin et les progrès devront être trouvés ailleurs (architectures, logiciels...).

Parallèlement à la course vers une plus grande intégration, on observe également une évolution vers les « systèmes sur la puce + (system on chip) dans lesquels on

---

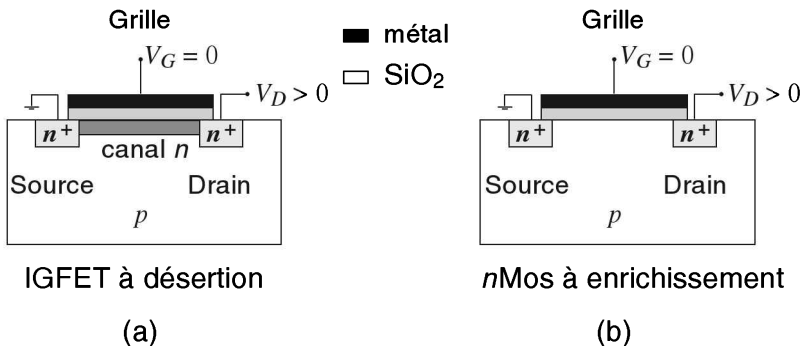
2. La lithographie permet de créer une image en relief sur la surface d'un substrat. Elle est basée sur l'interaction de photons ou de particules (surtout des électrons) avec des matériaux (résines que l'on appelle *resists*). Cette interaction induit des changements physiques ou chimiques dans le *resist* ce qui permet ensuite de le développer comme un film photographique. L'irradiation se fait au travers d'un masque qui permet de délimiter les régions qui seront insolées. La lithographie optique (jusqu'à l'ultraviolet très lointain) domine actuellement l'industrie micro-électronique. Alors qu'en 1978 on était capable, dans le cadre d'une production industrielle, de graver le silicium avec une précision de 4  $\mu\text{m}$ , on le grave maintenant avec une précision de 0,065  $\mu\text{m}$ . La réduction de taille, rendue possible par la lithographie, permet d'augmenter le nombre de transistors sur une même surface, donc d'accroître la puissance, et de diminuer la consommation électrique. Des difficultés apparaissent en lithographie optique pour descendre plus bas, d'une part à cause des sources de lumière, d'autre part car on ne peut plus courber les rayons lumineux. En laboratoire, on sait bien sûr graver plus finement le silicium et l'on peut descendre jusqu'à une dizaine de nm avec la lithographie par électrons. Cette dernière est très précise mais aussi beaucoup plus lente que la lithographie optique (les électrons balayent la surface à insoler alors que tous les photons arrivent en même temps). La réalisation d'un circuit intégré nécessite plusieurs étapes de lithographie (appelés niveaux de masquage) qui permettent de réaliser les transistors et leurs interconnexions. Actuellement on peut avoir plusieurs dizaines de niveaux de masquage.

essaye d'ajouter d'autres fonctionnalités que la micro-électronique classique (capteurs, actionneurs, fonctions biologiques...).

Pour les transistors à effet de champ que nous avons étudiés dans la section 9.3.1, les porteurs de charge qui circulent dans le canal proviennent du dopage. Certains transistors MOS fonctionnent de manière analogue. Nous en verrons un exemple dans la section 9.5.1. Une autre manière de créer des porteurs de charge est d'utiliser le processus d'inversion décrit dans la section 9.4 dans lequel une tension de polarisation fait passer, pour un semi-conducteur de type  $n$ , le bord de bande au-dessus de l'énergie de Fermi. Pour que ce phénomène soit efficace, il faut qu'il y ait une excellente isolation électrique entre la grille et le semi-conducteur. Nous en verrons un exemple dans la section 9.5.2

### 9.5.1 L'IGFET

Le schéma d'un IGFET (insulated gate FET) est indiqué dans la figure 9.7 (a) pour un transistor MOS canal  $n$ . Le substrat est le semi-conducteur de type  $p$  sur lequel on a déposé deux régions  $n^+$  fortement dopées qui correspondent à la source et au drain. Un canal, de type  $n$ , relie la source au drain. Une couche isolante d'oxyde de silicium, déposée au-dessus du silicium, isole le canal de la grille métallique. Cette structure MOS a une plus grande impédance d'entrée que le JFET et permet d'utiliser des courants de grille plus faibles.



**Figure 9.7** Schéma de principe d'un IGFET (FET à désertion) (a) et d'un transistor MOS à enrichissement (b).

Si la source et le substrat sont à la masse et le drain à un potentiel  $V_D > 0$ , les électrons circulent dans le canal de la source vers le drain. Si l'on applique un potentiel négatif  $V_G < 0$  à la grille, les électrons sont repoussés du canal et il apparaît une zone de déplétion au voisinage de l'interface isolant-semi-conducteur  $n$ . Comme le canal se rétrécit, le courant allant de la source au drain diminue pour pratiquement disparaître lorsqu'il y a pincement du canal. Un tel fonctionnement, dans lequel le

courant diminue lorsque la tension de grille augmente est qualifié de fonctionnement en *régime d'appauvrissement*.

Si l'on applique au contraire une tension positive à la grille ( $V_G > 0$ ), les électrons sont attirés et le courant augmente avec la tension. Ce courant sera supérieur à celui obtenu dans le régime d'appauvrissement et l'on dit que l'on est dans un *régime d'enrichissement*.

Pour une valeur donnée de la tension de drain-source  $V_{DS}$ , le potentiel grille-source  $V_{GS}$  détermine la conductivité du canal et donc le courant drain-source  $I_{DS}$ . Le courant  $I_{DS}$  est plus grand dans le mode enrichissement ( $V_{GS} > 0$ ) que dans le mode d'appauvrissement ( $V_{GS} < 0$ ); donc  $I_{DS}$  augmente lorsque  $V_{GS}$  augmente. Par ailleurs, pour  $V_{GS}$  fixé, le courant  $I_{DS}$  augmente lorsque  $V_{DS}$  augmente avant de saturer. L'IGFET fonctionne donc comme un amplificateur contrôlé par une tension ( $V_{GS}$  contrôle  $I_{DS}$ ).

### 9.5.2 Le transistor MOS à enrichissement

La structure d'un transistor MOS à enrichissement est très semblable à celle de l'IGFET à ceci près que le canal  $n$  n'existe pas. À l'équilibre, *i.e.* en l'absence de tension sur la grille, la capacité MOS est en régime de déplétion et le transistor est bloqué. Nous allons brièvement décrire le fonctionnement d'un transistor MOS canal  $n$ .

Le transistor MOS canal  $n$  est fabriqué sur un substrat semi-conducteur, le plus souvent du silicium, de type  $p$ . Il a la structure indiquée dans la figure 9.7 (b). La source et le drain sont des zones  $n^+$  fortement dopées en atomes accepteurs réalisées par diffusion. La grille métallique est séparée du substrat par une couche isolante. Comme l'isolant utilisé avec le silicium est son oxyde, on désigne cette structure MIS sous la dénomination de MOS. Le silicium permet de réaliser des interfaces silicium-oxyde d'excellente qualité, ce qui explique sa position dominante en micro-électronique.

En général, la source et le substrat sont à la masse et le drain est polarisé à une tension positive. Comme ils sont au même potentiel électrique, aucun courant ne circule dans la diode  $pn$  source-substrat. La diode  $pn$  drain-substrat est polarisée en inverse. Elle est donc bloquée et pratiquement aucun courant n'y circule.

Lorsque la tension de grille est positive et supérieure à la tension de seuil de la capacité MOS, il se crée une couche d'inversion de type  $n$  qui relie la source au drain et un courant circule de la source vers le drain. La largeur de la couche d'inversion est plus importante du côté source que du côté drain ; elle dépend de la tension drain-source.

## 9.6 HÉTÉROJONCTIONS

La jonction *pn* correspond au contact de deux zones du même semi-conducteur dont l'une est dopée *p* et l'autre *n*. On l'appelle pour cette raison une *homojonction*. Il existe de nombreux composés semi-conducteurs comme par exemple :

- les éléments de la colonne IV de la classification périodique (*Si*, *Ge*),
- les alliages de ceux-ci avec des éléments de la même colonne (*SiC*, *SiGe*, ...),
- les matériaux binaires composés d'éléments appartenant à des colonnes différentes de la classification périodique. C'est le cas des composés dit III–V dont un des éléments appartient à la colonne III et l'autre à la colonne V (*AsGa*, *InP*, *GaP*, *InSb*, *AlAs*, ...). Ils peuvent aussi appartenir à d'autres colonnes comme les composés II–VI (*CdTe*, *CdS*, *HgTe*, ...),
- les alliages ternaires (*GaAlAs*,  $Ga_{1-x}Al_xAs$ , *HgCdTe*, ...). Pour le composé  $Ga_{1-x}Al_xAs$ , *x* peut varier continûment de 0 à 1 permettant ainsi de faire varier le gap et la maille *a* du réseau de manière continue à partir de l'*AsGa* (*x* = 0,  $E_g = 1,5$  eV,  $a = 5,65$  Å) jusqu'à l'*AsAl* (*x* = 1,  $E_g = 2,36$  eV,  $a = 5,66$  Å). On peut également avoir des alliages quaternaires comme  $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$  pour lesquels le gap et le paramètre du réseau varient sur une large plage (cf. tableau 9.1).

**Tableau 9.1** Propriétés (dimension de la maille *a* et valeur du gap  $E_g$ ) des semi-conducteurs binaires intervenant dans le composé quaternaire  $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ . Parmi ces composés, seul *GaP* est à gap indirect.

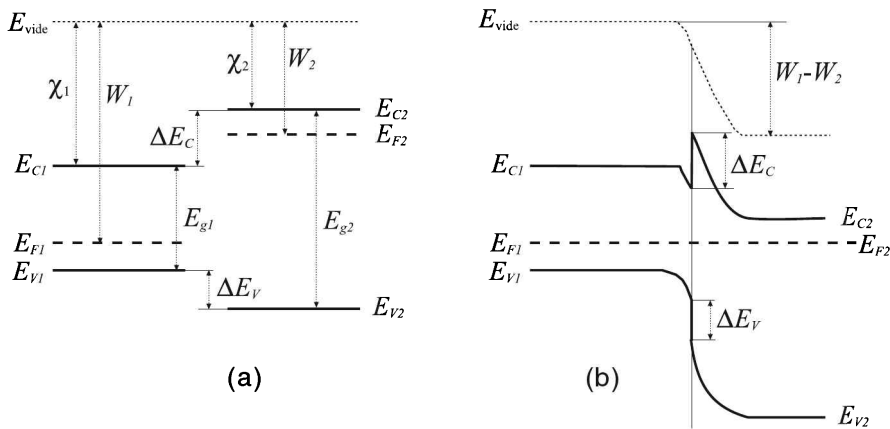
Semi-conducteur	$E_g$ (eV)	<i>a</i> (Å)
<i>GaP</i>	2,38	5,44
<i>InP</i>	1,37	5,86
<i>InAs</i>	0,42	6,05
<i>AsGa</i>	1,52	5,65

Ces semi-conducteurs conduisent tout naturellement à la notion d'*hétérojonction* dans laquelle deux cristaux semi-conducteurs différents sont en contact. Les structures intéressantes en électronique sont celles qui sont constituées de semi-conducteurs dont le gap et la maille de réseau sont très proches<sup>3</sup>. Leur traitement théorique est plus simple car la structure électronique de chacun des matériaux qui constituent la jonction ne change pas dans le volume. À l'interface, on suppose qu'il se produit une transition brutale des propriétés électroniques d'un semi-conducteur à l'autre. Il est

3. Les semi-conducteurs importants en électronique ont la structure cristalline du diamant ou de la blende de zinc. Par conséquent, c'est la valeur de la maille qui est importante pour voir s'il y a compatibilité entre 2 semi-conducteurs. Par exemple, les réseaux de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As$  et de l'*AsGa* sont pratiquement accordés sur un grand intervalle de *x*.

important d'évaluer ce saut à l'interface que l'on désigne souvent sous le nom d'*offset* de la bande de conduction ou de la bande de valence.

Étudions une hétérojonction idéale constituée de 2 semi-conducteurs dont les caractéristiques de bandes sont explicitées dans la figure 9.8 (a). Le semi-conducteur (1) est à gauche et le (2) à droite. Soient  $W_i$  le travail d'extraction,  $\chi_i$  l'affinité électronique,  $E_{Fi}$  l'énergie de Fermi,  $E_{Vi}$  le maximum de la bande de valence,  $E_{Ci}$  le minimum de la bande de conduction et  $E_{gi}$  le gap du semi-conducteur  $i$ . Le niveau de vide est noté  $E_{vide}$ . L'hétérojonction peut, par exemple, être formée d'*AsGa* dopé *p* pour le semi-conducteur (1) et d'alliage  $Al_xGa_{1-x}As$  pour le semi-conducteur (2). On aurait dans ce cas  $E_{g1} = 1,42$  eV et  $E_{g2} = 2$  eV si  $x = 0,4$ . L'hétérojonction est formée lorsque les 2 semi-conducteurs sont en contact<sup>4</sup>.



**Figure 9.8** (a) Schéma des semi-conducteurs avant la formation de l'hétérojonction. (b) Schéma de bandes de l'hétérojonction. Les définitions des quantités sont précisées dans le texte.

La figure 9.8 (b) montre, schématiquement, la structure de bandes de l'hétérojonction. Son élaboration tient compte des remarques suivantes :

- À l'équilibre, les deux niveaux de Fermi,  $E_{F1}$  et  $E_{F2}$  sont égaux.
- Le travail d'extraction de chaque semi-conducteur reste le même loin de l'interface. Cette condition permet de tracer l'évolution du niveau d'énergie du vide. Il s'ensuit une différence d'énergie potentielle entre les deux semi-conducteurs égale à  $W_2 - W_1$ , et, par conséquent, une tension de diffusion de la jonction égale à  $(W_1 - W_2)/e$ , négative puisque  $W_1 < W_2$ .

4. Cette structure est réalisée par épitaxie par jets moléculaires dans laquelle on évapore de manière contrôlée, dans une enceinte en ultravide, l'*As*, le *Ga* et l'*Al* à partir de creusets contenant ces matériaux portés à des températures indépendantes. En contrôlant parfaitement les processus d'évaporation de chacun des matériaux, on peut faire croître la structure cristalline couche atomique par couche atomique.



- La différence d'énergie entre le minimum de la bande de conduction des deux semi-conducteurs est égale à (figure 9.8 (a))  $\Delta E_C = \chi_1 - \chi_2 = \Delta\chi$ .
- La différence d'énergie entre le maximum des bandes de valence des deux semi-conducteurs est égale à (figure 9.8 (a))  $\Delta E_V = (\chi_2 + E_{g2}) - (\chi_1 + E_{g1}) = \Delta E_g - \Delta\chi$ , où  $\Delta E_g = E_{g2} - E_{g1}$ .

Les quantités  $\Delta E_C$  et  $\Delta E_V$  sont respectivement appelées l'offset de bande de conduction et l'offset de bande de valence. On remarque que  $\Delta E_C + \Delta E_V = \Delta E_g$ . Pour le cas particulier d'un transistor bipolaire, pour lequel  $\chi_1 = \chi_2$ , l'offset de bande de conduction disparaît.

La diffusion des électrons se produit du semi-conducteur (2) vers le semi-conducteur (1) puisque  $W_1 < W_2$  et celle des trous a lieu en sens inverse. Le raccordement des bandes est dissymétrique ; la variation la plus importante se produisant dans le semi-conducteur le moins dopé.

On constate, sur la figure 9.8 (b), une dissymétrie de la bande de conduction au voisinage de l'interface, avec une barrière et un puits, alors qu'il n'y a qu'une simple discontinuité dans la bande de valence. Ceci a des répercussions sur les transports des électrons et des trous. Il y a, en particulier, une accumulation d'électrons dans le puits formé dans la bande de conduction. La largeur de ce puits (typiquement de l'ordre de 10 à 15 nm) permet d'obtenir un gaz bidimensionnel d'électrons. En choisissant des semi-conducteurs avec un dopage différent, on peut former un gaz bidimensionnel de trous. Les hétérojonctions ont de nombreuses applications en électronique et en optoélectronique modernes.

## EXERCICES

---

### Exercice 9.1

On considère un transistor silicium npn à 300 K. La base, qui a une épaisseur de 1  $\mu\text{m}$ , est dopée avec  $N_d = 5 \times 10^{16}$  atomes  $\text{cm}^{-3}$  et le collecteur avec  $N_a = 5 \times 10^{15}$  atomes  $\text{cm}^{-3}$ . Calculer la largeur de la base lorsque la tension de polarisation de la base-collecteur (dans le sens bloquant) est de  $V_{bc} = 5$  V. Le nombre de porteurs du silicium intrinsèque est  $n_i = 1,45 \times 10^{10}$   $\text{cm}^{-3}$  et  $\epsilon_r = 11,9$ .

---

### Exercice 9.2

On considère une capacité MOS constitué de Al-SiO<sub>2</sub>-Si à 300 K. Le travail d'extraction de l'aluminium vaut  $W_m = 4,1$  eV, l'affinité électronique de la silice vaut 0,9 eV et celle du silicium  $\chi = 4,15$  eV. Calculer la hauteur de la barrière (*i.e.* la différence

entre le niveau de vide du semi-conducteur et celui du métal), lorsqu'il n'y a pas de tension appliquée entre le semi-conducteur et le métal. Le nombre de porteurs du silicium intrinsèque est  $n_i = 1,45 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ .

### Exercice 9.3

On considère une diode MOS de type  $p$ . On suppose que la largeur de déplétion peut se calculer de façon analogue à celle d'une jonction  $p$ - $n$  fortement dopée. Calculer celle-ci si  $N_a = 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ .

On donne la densité de porteurs intrinsèques  $n_i = 1,4 \times 10^{10}$  et la constante diélectrique du silicium  $\epsilon_r = 11,9$ .

## CORRIGÉS

### Exercice 9.1

Le calcul est analogue à celui d'une jonction  $pn$ . La largeur de la zone de déplétion vaut :

$$\ell_b = \sqrt{\frac{2\epsilon}{e}(V_0 + V_{bc}) \frac{N_d}{N_a(N_a + N_d)}}$$

La tension de la jonction vaut :

$$eV_0 = k_B T \text{Log} \left( \frac{N_a N_d}{n_i^2} \right) = 0,723 \text{ eV}$$

Pour une tension appliquée de 5 V, on a

$$\begin{aligned} \ell_b &= \sqrt{\frac{2 \times 11,9 \times 8,854 \times 10^{-12}}{1,6 \times 10^{-19}} 5,723 \frac{5 \times 10^{21}}{5 \times 10^{22} \times (5 \times 10^{21} + 5 \times 10^{22})}} \\ &= 0,12 \mu\text{m} \end{aligned}$$

### Exercice 9.2

A l'équilibre, les niveaux de Fermi du métal et du semi-conducteur sont égaux. Ni le travail d'extraction du métal,  $W_m$ , ni l'affinité du semi-conducteur ne changent. Le niveau d'énergie du vide se courbe au voisinage de la jonction et il apparaît une barrière dont la hauteur est :

$$eV = W_m - \chi - (E_C - E_F)$$

Le niveau de Fermi du silicium est donné par :

$$E_F = E_F^{(i)} + \frac{k_B T}{e} \ln \frac{N_a}{n_i} = \frac{E_g}{2} + \frac{k_B T}{e} \ln \frac{N_a}{n_i} = 0,56 + 0,23 = 0,79 \text{ eV}$$

Le niveau de Fermi est situé à 0,79 eV au-dessous de  $E_C$ , *i.e.*  $E_C - E_F = -0,79 \text{ eV}$ .  
On en déduit que  $eV = 0,84 \text{ eV}$ .

### Exercice 9.3

L'épaisseur de la zone de déplétion côté  $n$  d'une jonction  $p-n$  est donnée par  $\Delta e = \frac{1}{N_D} \sqrt{\frac{2\epsilon_r V N_A N_D}{e(N_A + N_D)}}$ . Si cette jonction est fortement dopée avec  $N_A \gg N_D$ , on a  $\Delta e = \sqrt{\frac{2\epsilon_r V}{e N_D}}$ . Pour la jonction MOS, on a par analogie  $\Delta e = \sqrt{\frac{2\epsilon_r V_{\text{inv}}}{e N_A}} = 2\sqrt{\frac{\epsilon_r V}{e N_A}}$  car  $V_{\text{inv}}$  est le potentiel d'inversion qui est le double du potentiel de la jonction. Comme  $V = \frac{k_B T}{e} \text{Log}(\frac{N_A}{N_i})$ , on a  $V = 0,32 \text{ V}$ . D'où  $\Delta e = 0,41 \mu\text{m}$ .

## Chapitre 10

---

# Propriétés optiques

Les photons peuvent interagir avec les électrons des semi-conducteurs. Ils peuvent aussi être créés lors de l'annihilation de paires électrons-trous. Ces propriétés permettent d'utiliser ces matériaux comme détecteurs de rayonnement ou comme sources lumineuses. On utilise l'absorption ou la création de photons dans des dispositifs mettant à la fois en jeu les électrons et les photons : c'est le domaine de l'électro-optique, de l'opto-électronique, de la photonique.

On classe les interactions du rayonnement avec les électrons d'un semi-conducteur en trois catégories :

- l'*absorption radiative*, dans laquelle un électron de valence passe dans la bande de conduction et le photon incident est absorbé ;
- l'*émission spontanée*, dans laquelle un électron de la bande de conduction s'annihile avec un trou de la bande de valence en émettant un photon ;
- l'*émission stimulée*, dans laquelle un photon induit la transition d'un électron de la bande de conduction vers un état vide de la bande de valence avec émission d'un photon de même énergie et de même phase.

### 10.1 ABSORPTION DE PHOTONS

Les photons induisent des transitions électroniques entre les états quantiques d'un matériau semi-conducteur. Ainsi, l'absorption d'un photon d'énergie convenable peut faire passer un électron de la bande de valence vers la bande de conduction. Pour un semi-conducteur pur, ce n'est possible que si l'énergie du photon est supérieure au gap. Toutefois, pour un semi-conducteur réel, on peut observer des transitions pour des énergies inférieures lorsqu'il existe des états localisés en énergie dans la bande

interdite située entre la bande de valence et celle de conduction. Ces états peuvent avoir pour origine des défauts dans le semi-conducteur, des impuretés, ou provenir de la surface du matériau. Ils ont la propriété d'être localisés dans l'espace.

Lors de la collision d'un photon et d'un électron, il y a bien entendu conservation de l'énergie et de l'impulsion. Ceci nous amène à considérer deux cas : les semi-conducteurs à gap direct et ceux à gap indirect.

### 10.1.1 Semi-conducteurs à gap direct

Les semi-conducteurs à gap direct sont ceux pour lesquels le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction ont le même vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  ( $\mathbf{k}(E_C) = \mathbf{k}(E_V)$ ). Sachant qu'un photon ayant une énergie de 1 eV a une longueur d'onde de  $\lambda = 1,24 \mu\text{m}$ , le nombre d'onde du photon,  $k_{h\nu} = 2\pi/\lambda$  (l'ordre de grandeur à considérer est  $\approx 10^{-3} \text{\AA}^{-1}$ ), est très faible devant les valeurs de  $k$  des électrons (l'ordre de grandeur est  $\approx 1 \text{\AA}^{-1}$ ). Par conséquent, tout se passe comme si le moment du photon,  $\hbar k_{h\nu}$ , était nul et la transition se représente verticalement dans un diagramme en énergie.

Soit  $E_i$  l'énergie initiale de l'électron dans la bande de valence et  $\mathbf{k}_i$  son vecteur d'onde. Après interaction avec un photon d'énergie  $\hbar\omega$ , où  $\omega$  est la pulsation du photon ( $\omega = 2\pi\nu$ , où  $\nu$  est la fréquence de l'onde électromagnétique associée), son énergie dans la bande de conduction devient  $E_f$  et son vecteur d'onde  $\mathbf{k}_f$ . La conservation de l'énergie et de l'impulsion se traduisent par :

$$E_f = E_i + \hbar\omega \quad \text{et} \quad \hbar\mathbf{k}_f = \hbar\mathbf{k}_i, \text{ soit } \mathbf{k}_f = \mathbf{k}_i \quad (10.1)$$

Lorsque ces conditions sont satisfaites, on dit que l'on a une *transition directe*.

À température  $T = 0 \text{ K}$ , la bande de valence est complètement remplie et la bande de conduction totalement vide. Lorsque l'énergie du photon est inférieure à celle du gap  $E_g$ , le matériau est transparent. L'absorption commence pour une énergie  $\hbar\omega_s = E_g = E_C - E_V$ , où  $E_C$  est l'énergie du minimum de la bande de valence et  $E_V$  celle du maximum de la bande de conduction. Dans ce cas, un électron du haut de la bande de valence peut être excité vers le bas de la bande de conduction. Au-dessus de ce seuil, l'absorption augmente fortement car de nombreuses possibilités d'excitation, liées à l'augmentation de la densité d'états accessibles, s'ouvrent. La mesure du seuil d'absorption permet, pour les semi-conducteurs à gap direct, de mesurer directement la valeur de celui-ci.

### 10.1.2 Semi-conducteurs à gap indirect

Pour un semi-conducteur à gap indirect, comme le silicium par exemple, le maximum de la bande de valence est situé à une valeur de  $\mathbf{k}$  différente du minimum de la bande de conduction ( $\mathbf{k}(E_C) \neq \mathbf{k}(E_V)$ ). Le photon ne peut exciter directement un électron

car l'impulsion ne serait pas conservée. On qualifie ces excitations de *transitions indirectes*. La loi de conservation de la quantité de mouvement ne peut être satisfaite que si l'on fait intervenir un phonon, *i.e.* un quantum de vibration du cristal. Si  $\hbar\Omega$  est l'énergie d'un phonon et  $\hbar\mathbf{q}$  son impulsion, les lois de conservation se traduisent alors par :

$$E_i + \hbar\omega + \hbar\Omega = E_f \quad \text{et} \quad \mathbf{k}_i + \mathbf{q} = \mathbf{k}_f \quad (10.2)$$

ou par :

$$E_i + \hbar\omega = E_f + \hbar\Omega \quad \text{et} \quad \mathbf{k}_i = \mathbf{k}_f + \mathbf{q} \quad (10.3)$$

Dans ces équations de conservation, nous avons négligé l'impulsion du photon qui est très petite devant les autres. Les premières relations (équation (10.2)) correspondent aux lois de conservation relatives au mécanisme dans lequel le photon interagit avec un électron de valence et un phonon pour donner, dans la voie finale, un électron dans la bande de conduction et un trou dans la bande de valence (paire électron-trou). Le seuil de cette excitation correspond à  $E_f - E_i = E_g$ , *i.e.* à une énergie de photon égale à  $\hbar\omega = E_g - \hbar\Omega$ . Le seuil correspond à une énergie légèrement inférieure au gap  $E_g$ . Comme les énergies de phonon sont très petites ( $\approx 0,01-0,03$  eV) comparées à la valeur du gap  $E_g$ , la mesure du seuil d'absorption fournit une bonne indication du gap. Les phonons ont des énergies faibles mais peuvent avoir une grande impulsion, comparable à celle des électrons et des trous.

Les relations (10.3) correspondent à la situation dans laquelle le photon excite un électron de la bande de valence et disparaît comme dans le cas précédent. Dans la voie finale, on obtient un électron dans la bande de conduction, un trou dans la bande de valence et un phonon. Le seuil en énergie correspond à une énergie de photon égale  $\hbar\omega = E_g + \hbar\Omega$ , *i.e.* supérieure au gap.

Alors que les transitions directes sont des processus à 2 corps (création d'une paire électron-trou par interaction électron-photon), les transitions indirectes sont des processus à 3 corps (électron-photon-phonon  $\rightarrow$  électron-trou ; ou électron-trou  $\rightarrow$  électron-trou-phonon). La probabilité des transitions indirectes est par conséquent inférieure à celle des transitions directes.

Les mesures d'absorption optique permettent de déterminer l'énergie du gap ainsi que celle des états localisés dans la bande interdite située entre la bande de valence et la bande de conduction.

### 10.1.3 Impuretés

Les semi-conducteurs dopés *n* ou *p* ont des niveaux, localisés dans l'espace, situés dans la bande interdite séparant la bande de conduction de la bande de valence. Pour un semi-conducteur comme le silicium et des dopants usuels ne donnant pas de niveaux profonds (*B*, *As*), le niveau donneur est situé juste au-dessous de la bande

de conduction et le niveau accepteur juste au-dessus de la bande de valence. À la température ordinaire, les électrons des niveaux donneurs passent dans la bande de conduction et des électrons de la bande de valence passent dans les niveaux accepteurs.

À température nulle, des niveaux donneurs d'un semi-conducteur de type  $n$ , situés à  $E_d$  (sous  $E_C$ ), sont occupés. Les niveaux accepteurs d'un semi-conducteur de type  $p$ , situés à  $E_a$  (au-dessus de  $E_V$ ), sont vides. Il suffit donc d'un photon d'énergie  $E_C - E_d$ , pour un semi-conducteur de type  $n$ , pour faire passer ces électrons dans la bande de conduction. Pour un semi-conducteur de type  $p$ , un photon d'énergie  $E_a - E_V$  fait passer un électron de la bande de valence dans un niveau accepteur. Les seuils d'absorption sont donc respectivement  $E_C - E_d$  ou  $E_a - E_V$  selon que le semi-conducteur est de type  $n$  ou  $p$ . Ces excitations sont qualifiées d'*extrinsèques* par opposition aux excitations *intrinsèques* dont nous avons parlé plus haut. La probabilité d'excitations extrinsèques est beaucoup plus faible car le nombre d'impuretés, typiquement de l'ordre de  $10^{14}$ - $10^{16}$   $\text{cm}^{-3}$ , est très inférieur au nombre d'électrons intervenant dans les excitations intrinsèques ( $\approx 10^{22}$   $\text{cm}^{-3}$ ).

Les niveaux profonds, obtenus avec certaines impuretés, sont situés plus loin des bandes de conduction et de valence. Ils peuvent être multiples et conduisent à des seuils d'excitation plus élevés que les précédents.

### 10.1.4 Transitions interbandes et intrabandes

Pour qu'un électron passe d'un état quantique initial vers un état quantique final, il faut que ce dernier soit vide car les électrons sont des fermions qui doivent satisfaire au principe d'exclusion de Pauli. La bande de valence est complètement remplie à température nulle, et la bande de conduction est vide, ce qui nous a amené à considérer les transitions entre la bande de valence et la bande de conduction que l'on qualifie de *transitions interbandes*. À température finie la bande de valence est légèrement dépeuplée libérant ainsi quelques états quantiques. Il peut y avoir des transitions d'électrons d'un niveau de la bande de valence vers un des états libres de celle-ci. Ces transitions à l'intérieur d'une même bande sont appelées *transitions intrabandes*. Elles sont, pour les semi-conducteurs, négligeables par suite du faible nombre de niveaux quantiques disponibles. Ce n'est par contre pas le cas pour les métaux dont la bande de valence est partiellement remplie. Les transitions intrabandes conduisent à une absorption continue dans le domaine infrarouge. Elles peuvent être directes ou indirectes si elles font intervenir un ou plusieurs phonons.

Pour une énergie des photons plus élevée, on peut avoir des transitions interbandes entre des bandes permises non contiguës. Ce processus est plus fréquent pour les métaux dont deux bandes contiguës se recouvrent en énergie.

### 10.1.5 Applications

Les photons absorbés par un semi-conducteur génèrent des porteurs de charge. Ils peuvent donc être utilisés comme détecteurs de photons. La bande de fréquences ou de longueurs d'onde qui peuvent être absorbées est une caractéristique importante du matériau et conditionne, en partie, son domaine d'utilisation. Rappelons qu'une énergie de 1 eV correspond à une longueur d'onde de 1 240 nm, *i.e.* située dans l'infrarouge, alors que le spectre visible s'étend de 300 nm à 780 nm. Nous allons maintenant citer quelques exemples.

Le sulfure de cadmium,  $CdS$ , est un semi-conducteur à gap direct de structure hexagonale compacte pour lequel  $E_g \approx 2,4$  eV à la température ordinaire (2,58 eV à 0 K). Son gap est direct et il est utilisé pour détecter des photons dans le visible. Son seuil, situé vers  $\lambda_s = 520$  nm, correspond à la lumière verte. Il absorbe les photons dont la longueur d'onde est inférieure à cette valeur. Les longueurs d'ondes supérieures à la valeur de seuil (lumière orange et rouge) ne sont pas absorbées ce qui donne une couleur jaune orangée au cristal.

Un semi-conducteur dont le gap est de l'ordre de l'eV ou inférieur absorbe dans l'infrarouge ; c'est le cas du silicium ( $E_g = 1,17$  eV,  $\lambda_s = 1\,060$  nm) ou du germanium ( $E_g = 0,74$  eV,  $\lambda_s = 1\,680$  nm). C'est aussi le cas de matériaux II–VI comme  $PbSe$  ( $E_g = 0,16$  eV,  $\lambda_s = 8\,270$  nm).

Le seuil d'absorption intrinsèque des semi-conducteurs est en général toujours supérieur à quelques centièmes d'eV ce qui donne une valeur supérieure pour la longueur d'onde d'absorption. Pour absorber de plus grandes longueurs d'onde, il faut utiliser des niveaux d'impuretés (absorption extrinsèque). En effet, celles-ci permettent de créer des niveaux d'énergie dans la bande interdite qui peuvent être très proches de la bande de conduction ou de valence. Des photons dont la longueur d'onde est de l'ordre d'une centaine de  $\mu m$  peuvent alors être absorbés. On peut aussi utiliser des niveaux profonds, avec des dopants, comme l'or ou le mercure par exemple, pour avoir des valeurs de gap plus grandes. Ainsi, le germanium dopé au mercure a un seuil d'absorption de 14  $\mu m$ .

### 10.1.6 Photoconduction

L'absorption de photons génère des porteurs de charges. Ce phénomène peut être utilisé de différentes manières comme la *photoconduction*.

La modification du nombre de porteurs de charge sous un éclairage lumineux change la conductivité (ou résistivité) du matériau. C'est le phénomène de *photoconductivité*. En l'absence de rayonnement, la conductivité  $\sigma$  du matériau est reliée à la charge élémentaire  $e$ , à la mobilité  $\mu_e$  ( $\mu_h$ ) et au nombre de porteurs par unité de volume  $n_e$  ( $n_h$ ) par la relation  $\sigma = n_e e \mu_e + n_h e \mu_h$ . Un accroissement  $\Delta n_e$  d'électrons et  $\Delta n_h$  de trous conduit à un changement de conductivité égal à  $\Delta \sigma = (\Delta n_e) e \mu_e + (\Delta n_h) e \mu_h$ .



Si un champ électrique est appliqué au matériau, *i.e.* s'il est soumis à une différence de potentiel, le courant qui circule augmente lorsque l'on passe de l'obscurité à la lumière. Pour pouvoir collecter les porteurs de charge, il faut qu'ils puissent traverser l'échantillon sans disparaître. Le paramètre important est le gain de photoconduction qui est le rapport entre le nombre d'électrons qui traversent l'échantillon et le nombre de photons absorbés. Ce gain est proportionnel au temps de vie des porteurs de charge et inversement proportionnel au temps de transit dans l'échantillon.

L'électrophotographie est une des applications de la photoconductivité. On utilise le sélénium (ou le silicium) amorphe<sup>1</sup> comme matériau photoconducteur. Il est déposé sous forme d'une couche mince sur une surface métallique, un cylindre appelé tambour, qui tourne autour de son axe de symétrie. Tout comme les semi-conducteurs cristallins, le sélénium amorphe a une structure de bande mais elle est un peu plus complexe que celle du matériau cristallin, avec un gap de l'ordre de 2,1 eV à la température ordinaire. La résistivité de ce matériau est très élevée, typiquement de l'ordre de  $10^{14} \Omega \cdot m$ . Le principe de la photocopie est alors le suivant. On charge tout d'abord le film par effet corona (décharge électrique réalisée par un fil situé parallèlement à une génératrice du cylindre). Cette charge reste stockée sur le film par suite de sa grande résistivité. Lorsque l'on projette une image sur le film, les zones insolées deviennent, par le phénomène de photoconductivité, conductrices et les charges peuvent s'évacuer ; celles qui ne sont pas insolées restent très résistives et conservent leur charge électrique. Par ce phénomène de photoconduction, l'image que l'on veut photocopier est transformée en image électrique sur le film de sélénium. Un pigment (appelé *toner*) est projeté sur ce film. Il se fixe, par effet électrostatique, sur les zones non insolées, *i.e.* chargées en électricité. On transfère ensuite l'image sur du papier ordinaire en utilisant encore l'effet corona créé avec un fil électrique passant à l'arrière du papier. Le pigment est fixé sur le papier par chauffage. Le dispositif est ensuite nettoyé et le tambour déchargé électriquement dans sa totalité par illumination.

Les photocopieuses et imprimantes laser utilisent ce principe. L'image latente est formée sur le tambour en mouvement par le balayage d'un faisceau laser sur un miroir en rotation. On utilise un laser hélium-néon qui émet à 632,8 nm car le pic d'absorption du silicium amorphe se situe vers 700 nm.

### 10.1.7 Détection de photons

Certains semi-conducteurs permettent de détecter des photons et sont utilisés pour réaliser des photodétecteurs qui ont des applications dans de nombreux domaines. La détection de photons fait intervenir 3 étapes :

- la génération de porteurs par interaction des photons incidents avec le semi-conducteur,

---

1. Dans un matériau amorphe, il n'y a pas d'ordre cristallin à grande distance.

- le transport et la multiplication des porteurs de charge permettant de produire un courant électrique mesurable,
- la transformation du photocourant généré en signal traité par un circuit électronique.

Un photon n'est efficace que si son énergie est supérieure à un certain seuil. Par ailleurs, les charges générées doivent être collectées avant qu'elles se recombinent. Ceci peut être résolu en créant une zone de déplétion au voisinage d'une jonction ou d'un contact. Dans ce cas, le champ électrique régnant dans la zone désertée permet de séparer les porteurs de charges de signes opposés. Le choix de l'épaisseur de la zone désertée est un compromis entre une grande épaisseur, qui permet d'absorber un grand nombre de photons incidents et donc de créer de nombreuses paires électron-trou, et une faible épaisseur qui permet de rapidement collecter ces charges et de délivrer un signal rapide.

Les paires électron-trou formées lors de l'interaction rayonnement-matière peuvent être détectées selon deux modes possibles : le mode photodiode ou le mode photovoltaïque. En mode photodiode, la diode est polarisée en inverse et le courant inverse circule entre les régions  $p$  et  $n$ . En mode photovoltaïque, le dispositif est laissé en circuit ouvert et une différence de potentiel, due aux charges créées, apparaît entre les zones  $p$  et  $n$ .

#### a) Photodiodes

Si l'on polarise en inverse la zone désertée d'une jonction de type  $p-n$ , un photon absorbé dans cette zone crée une paire électron-trou. Les porteurs de charge générés dans la zone de déplétion donnent le photocourant. À ceux-ci vont s'ajouter les porteurs générés près de la zone désertée (région  $p$  pour les trous et région  $n$  pour les électrons) qui se trouvent à une distance inférieure à la longueur de diffusion de l'interface. Il s'ensuit que le courant inverse augmente, d'autant plus que l'intensité lumineuse augmente. Dans un tel dispositif, le courant inverse est pratiquement indépendant de la tension inverse appliquée dans un très large domaine de fonctionnement.

L'*efficacité quantique* du détecteur, qui donne le nombre de paires électron-trou générées par photon, dépend fortement de la longueur d'onde. On observe en général un pic qui peut être assez large en longueur d'onde. En effet, pour les grandes longueurs d'onde il y a une coupure. Elle est due au seuil de photoconduction qui dépend de la température puisque le gap dépend de celle-ci. Il y a une autre coupure aux courtes longueurs d'ondes qui provient du fait que l'absorption se fait en surface et que la durée des porteurs de charge devient très courte. Ces derniers contribuent donc peu au photocourant.

Un photodétecteur ayant une grande zone désertée est plus sensible puisque le volume de détection est supérieur. Une manière d'augmenter le volume de cette zone

est d'utiliser une structure *pin* dans laquelle *i* désigne une zone de semi-conducteur intrinsèque de haute pureté. Cette dernière a une beaucoup plus grande résistivité que les régions *p* et *n*. Par conséquent, la différence de potentiel appliquée à la jonction se retrouve pratiquement aux bornes de la zone intrinsèque *i*. Les matériaux les plus utilisés pour faire des diodes *pin* sont des alliages III–V et II–VI (*HgCdTe*, par exemple) dont on peut varier la composition et ainsi changer la valeur du gap.

### b) Dispositifs photovoltaïques

Le diagramme d'énergie d'une jonction *pn* non polarisée est montré sur la figure 8.1 (c). La hauteur de la barrière séparant la zone *n* de la zone *p* est  $eV_0$ . La différence de potentiel  $V_0$  conduit à un champ électrique,  $\vec{E}_0$ , dirigé de *n* vers *p*. L'arrivée de photons sur le détecteur crée des porteurs de charges, électrons et trous (figure 10.1). Le champ électrique  $\vec{E}_0$  a tendance à déplacer ces porteurs, vers la zone *n* pour les électrons et vers la zone *p* pour les trous. Cette séparation des porteurs de charge créés se traduit par l'apparition d'un champ électrique,  $\vec{E}'$ , opposé à  $\vec{E}_0$ , et donc à une diminution de la hauteur de la barrière d'une valeur  $eV_f$ . Par conséquent, il apparaît une différence de potentiel  $V_f$  entre la zone *p* et la zone *n* (le potentiel du côté *n* est plus petit que celui du côté *p*). L'effet photovoltaïque est l'apparition d'une différence de potentiel aux bornes d'une jonction illuminée.

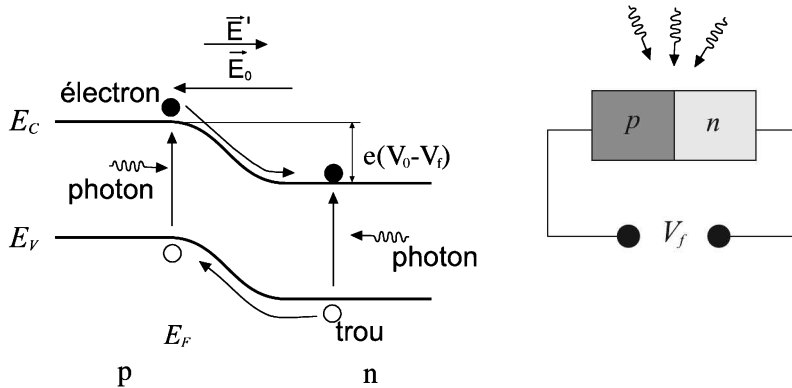


Figure 10.1 Principe d'une cellule photovoltaïque.

Si le flux de photons augmente, le nombre de porteurs de charge augmente ainsi que le potentiel  $V_f$ . Néanmoins, celui-ci est limité par la valeur  $V_0$  qui correspond au cas où le champ  $\vec{E}'$  est égal et opposé à  $\vec{E}_0$ . Dans ce cas, la barrière séparant la zone *n* de la zone *p* disparaît. Par ailleurs,  $eV_0 = E_F^{(n)} - E_F^{(p)}$ . Comme,  $E_F^{(n)}$  est proche de  $E_C$  et que  $E_F^{(p)}$  est proche de  $E_V$ , il s'ensuit que  $eV_0 \simeq E_g$  et que  $V_f \simeq E_g/e$ . Le choix du semi-conducteur conditionne la tension obtenue puisqu'elle augmente avec

la valeur du gap. Le domaine de fréquences qui conduit à l'effet photovoltaïque est un paramètre tout aussi important car il va conditionner le domaine d'utilisation. Si l'on connecte la jonction à une résistance de charge, on obtient un courant électrique et le dispositif permet de convertir l'énergie lumineuse en énergie électrique.

Les cellules en sélénium utilisées autrefois en photographie pour mesurer la quantité de lumière sont basées sur l'effet photovoltaïque d'une forme cristalline particulière du sélénium pour lequel  $E_g \simeq 1,8 \text{ eV}$ .

Les cellules solaires sont basées sur ce principe. Elles permettent de convertir l'énergie lumineuse reçue du soleil en énergie électrique. On utilise du silicium, sous forme cristalline, polycristalline ou amorphe. Les rendements sont meilleurs avec le silicium monocristallin ( $\approx 15 \%$ ) qu'avec le silicium polycristallin qui a lui même un meilleur rendement que le silicium amorphe ( $\approx 10 \%$ ).

## 10.2 ÉMISSION SPONTANÉE DE PHOTONS

Lorsqu'un électron se recombine avec un trou, un photon peut être émis. Ce processus, désigné sous le terme général de *luminescence*<sup>2</sup>, est utilisé pour réaliser des sources de lumière ou pour caractériser un matériau. Pour un semi-conducteur, l'émission de photons qui résulte de l'annihilation d'un électron de la bande de conduction avec un trou situé dans la bande de valence est qualifiée d'*émission radiative*.

### 10.2.1 Luminescence

Lorsque le processus de recombinaison électron-trou se fait par transition d'un électron de la bande de conduction vers un état vide de la bande de valence (trou), on le qualifie de transition bande à bande. Il peut se produire pour les semi-conducteurs à gap direct ou indirect. Dans les deux cas, il y a conservation de l'énergie et de l'impulsion et la discussion que nous avons eue dans les sections 10.1.1 et 10.1.2 reste valable à condition de permuter l'état initial et l'état final (indices  $i \leftrightarrow f$ ). La probabilité de recombinaison dans un semi-conducteur à gap direct est bien supérieure à celle correspondant à un semi-conducteur à gap indirect pour lequel il faut faire intervenir un phonon.

Pour un semi-conducteur à gap direct, l'énergie minimale émise par luminescence dans une transition bande à bande est égale au gap  $E_g$ . Pour un semi-conducteur à gap indirect elle est égale à  $E_g - \hbar \Omega$ , i.e. proche de  $E_g$ .

---

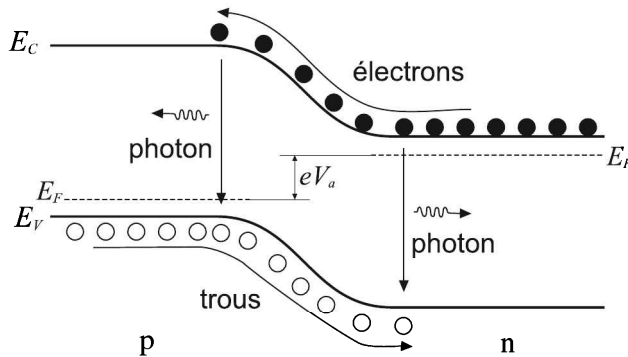
2. De manière générale, on parle de *photoluminescence* lorsque l'excitation est optique et d'*electroluminescence* lorsque celle-ci est d'origine électrique. Le phénomène de luminescence peut aussi avoir d'autres origines : *thermoluminescence* (due à une variation de température), *chemiluminescence* (excitation par réaction chimique), *cathodoluminescence* (excitation par irradiation d'électrons), *triboluminescence* (excitation par frottement), etc.

Pour l'*AsGa*, dont le gap vaut  $E_g = 1,42$  eV, on a  $\lambda \simeq 870$  nm ce qui correspond au proche infrarouge. On peut générer de la lumière dans le spectre visible ( $\approx 400$ -800 nm) en utilisant des matériaux semi-conducteurs ayant un plus grand gap comme, par exemple, des composés de type III-V. L'*AsGa* appartient à cette famille mais il en existe d'autres (*InP*, *GaP*, *InAs*). L'utilisation de composés ternaires du type  $Ga_xAl_{1-x}As$  ou quaternaires  $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ , où  $0 \leq x \leq 1$  et  $0 \leq y \leq 1$ , permettent de fabriquer des semi-conducteurs ayant un gap compris entre celui de l'*AsGa* ( $E_g = 1,42$  eV) et celui de l'*AlAs* ( $E_g = 2,16$  eV) pour les ternaires cités ; et ceux de *GaP* ( $E_g = 2,26$  eV) et de l'*InAs* ( $E_g = 0,36$  eV) pour les quaternaires.

Il y a aussi émission de photons lorsqu'un électron est transféré de la bande de conduction à un niveau d'impureté donneur vide, ou d'un niveau accepteur plein vers un état vacant de la bande de valence. L'énergie du photon est alors très faible (par exemple de l'ordre de 0,03 eV au maximum pour l'*AsGa* dopé *n*). Il peut aussi y avoir des transitions entre deux niveaux d'impuretés.

### 10.2.2 Diodes électroluminescentes

Les diodes électroluminescentes ou LED (Light Emitting Diode) sont une application de la luminescence des semi-conducteurs. Leur principe de fonctionnement consiste à injecter des électrons et des trous à travers une jonction *pn* polarisée dans le sens passant. La lumière émise est incohérente et sa largeur en longueur d'onde vaut typiquement 30 à 40 nm.



**Figure 10.2** Principe de fonctionnement de la diode électroluminescente.

Le principe de fonctionnement de la diode électroluminescente est indiqué sur la figure 10.2 où l'on montre la structure de bandes du dispositif. Il s'agit d'une jonction *pn* polarisée dans le sens passant avec une tension  $V_a$ . Les niveaux de Fermi des régions *p* et *n* sont séparés par une distance  $eV_a$ . Si la tension de polarisation est suffisante, la barrière est fortement abaissée. Les électrons de la région *n* sont injectés dans la région *p* où ils se recombinent avec des trous en émettant des photons. De

même, des trous de la région  $p$  sont injectés dans la région  $n$  où ils se recombinaient avec des électrons en émettant un photon. Les photons sont essentiellement émis à proximité de la jonction  $pn$ , le nombre de ceux venant de la zone désertée étant plus faible.

La recombinaison radiative des électrons et des trous est le processus dominant pour les semi-conducteurs à gap direct. Ce n'est pas le cas pour les semi-conducteurs à gap indirect, comme le silicium, pour lesquels la recombinaison s'accompagne, pour une grande part, d'une émission de chaleur.

## 10.3 ÉMISSION STIMULÉE

Dans certaines conditions, un photon incident peut créer un second photon de même énergie, de même phase, de même polarisation et de même direction de propagation. C'est le phénomène d'émission stimulée. Ce mécanisme, prédit en 1917 par Einstein, est la base du fonctionnement des lasers dont le premier a été réalisé en 1960. Il y a amplification car, partant d'un photon initial, on obtient deux photons dans la voie finale. Toutefois, la probabilité d'émission stimulée d'un photon est faible, si bien qu'il n'y a généralement pas d'amplification dans le milieu sauf dans des conditions particulières.

### 10.3.1 Principe du laser

Considérons la transition d'un système de l'état d'énergie  $E_2$  vers un état d'énergie  $E_1$  ( $E_2 > E_1$ ). L'état  $E_2$  peut, par exemple, correspondre à un électron dans la bande de conduction et l'état  $E_1$  à un trou dans la bande de valence. La transition  $E_2 \rightarrow E_1$  peut se faire par émission spontanée, avec émission d'un photon d'énergie  $\hbar \omega_{12} = E_2 - E_1$ , ou par émission non radiative, avec création de phonons. Pour qu'il y ait émission stimulée, il faut disposer d'un photon d'énergie  $\hbar \omega_{12}$  dans le milieu. Ce dernier, s'il interagit selon ce processus, crée deux photons mais la probabilité est généralement faible si bien qu'il n'y a pas, dans la plupart des cas, d'amplification dans le matériau. La probabilité d'interaction est proportionnelle au nombre de systèmes dans l'état  $E_2$ . Par conséquent, il faut, pour avoir amplification, qu'il y ait un grand nombre de systèmes dans l'état excité. Pour un matériau en équilibre, la population de l'état excité est bien inférieure à celle de l'état fondamental puisqu'elle est donnée, pour un système classique à la température  $T$ , par la distribution de Boltzmann qui est une exponentielle décroissante. C'est la raison pour laquelle il faut disposer d'un moyen auxiliaire pour que l'état excité soit plus peuplé que l'état fondamental. On réalise ainsi une *inversion de population*. Dans les lasers solides classiques, cette inversion de population se fait, dans les cas les plus simples, grâce à un troisième niveau d'énergie, situé au-dessus de  $E_2$ , que l'on peuple par excitation. Cette dernière peut être faite par des photons : c'est le *pompage optique*. L'état obtenu se désexcite alors rapidement,

souvent de façon non radiative, vers le niveau qui nous intéresse et qui a une durée de vie plus longue. Par ce moyen indirect, on réalise donc l'inversion de population des niveaux  $E_1$  et  $E_2$ .

Pour réaliser un laser, il faut un milieu actif susceptible d'amplifier la lumière par émission stimulée et réaliser deux opérations :

- L'*inversion de population* que l'on appelle aussi *pompage*.
- L'*amplification*. Cette dernière est réalisée par *émission stimulée* dans un *résonateur optique* qui amplifie l'intensité lumineuse et sélectionne certaines fréquences.

Le résonateur optique permet de faire passer le même photon plusieurs fois dans le matériau ce qui augmente sa probabilité d'induire une émission stimulée. Ce résonateur est généralement constitué de deux miroirs mis face à face à chacune des extrémités du matériau. Ceux-ci sont semi-transparents pour extraire l'énergie du laser à intervalles réguliers. Le principe du laser est résumé dans la figure 10.3.

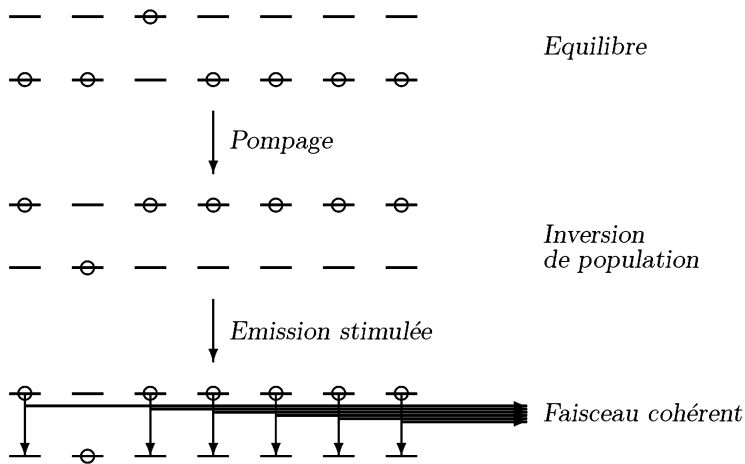


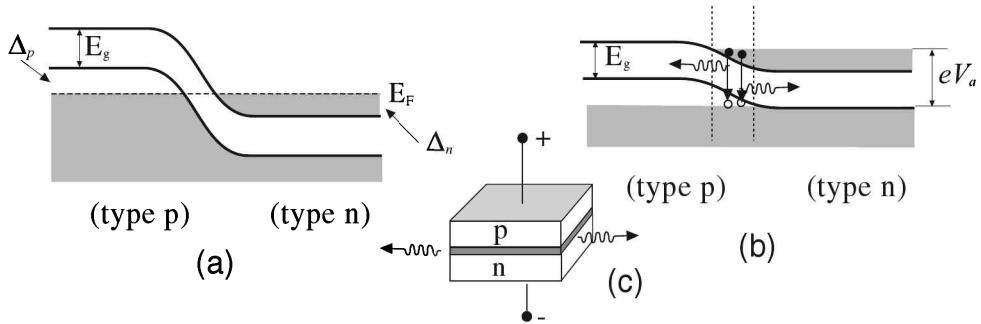
Figure 10.3 Principe du laser.

Les lasers fournissent une lumière *cohérente*, *intense* et *monochromatique*. On peut réaliser des lasers à base de semi-conducteurs mais la cohérence de la lumière et les caractéristiques du faisceau émis par ceux-ci sont nettement moins bonnes que celles que l'on obtient avec les lasers classiques.

### 10.3.2 Lasers semi-conducteurs

Dans un laser semi-conducteur, il faut aussi créer l'inversion de population. Considérons tout d'abord le cas d'une jonction *pn* fortement dopée (avec une concentration de dopants supérieure à  $\approx 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ). Dans ce cas, le niveau de Fermi de la région

$p$  passe dans la bande de valence et celui de la région  $n$  dans la bande de conduction (cf. section 9.2). On dit que la jonction est dégénérée. Cela signifie que la bande de conduction de la région  $n$  est remplie d'électrons de  $E_C$  à  $E_C + \Delta_n = E_F^{(n)}$ , et que la bande de valence de la région  $p$  est inoccupée de  $E_V - \Delta_p = E_F^{(p)}$  à  $E_V$ . À l'équilibre, on a la configuration de bandes de la figure 10.4 (a).



**Figure 10.4** Jonction  $pn$  dégénérée à l'équilibre (a) et polarisée dans le sens direct avec la tension  $V \approx E_g/e$  (b).

Si l'on applique une tension  $V_a \approx E_g/e$  à la jonction  $pn$  dans le sens direct, on aboutit à la configuration qui est illustrée dans la figure 10.4 (b). Il y a inversion de population dans la région de l'interface ; c'est la *zone active* de la diode laser. Dans cette région, les électrons et les trous peuvent se recombiner en donnant naissance à des photons. Ces derniers peuvent à leur tour exciter un électron de la bande de valence vers la bande de conduction ou conduire à une émission stimulée en faisant passer un électron de la bande de conduction vers un trou de la bande de valence. Pour qu'il y ait effet laser, il faut que le milieu soit amplificateur, *i.e.* qu'il y ait un gain de photons. Pour cela on fait passer plusieurs fois les photons dans la zone active en réfléchissant ceux-ci, vers l'intérieur du semi-conducteur, aux deux extrémités de la diode. Contrairement aux autres lasers solides pour lesquels on utilise des miroirs externes, on dispose ici de miroirs naturels qui sont les deux plans de clivage du cristal situés à chacune de ses extrémités. La réflexion sur la surface des plans de clivage est typiquement de l'ordre de 30 %. Elle provient de la différence d'indice de réfraction entre le semi-conducteur et l'air<sup>3</sup>.

Pour l' $AsGa$ , et pour d'autres composés III–V, les plans de clivage correspondent aux plans parallèles à (110). Par contre, la croissance du cristal se fait parallèlement au plan (100). Les plans de clivage sont parallèles à l'axe de symétrie de la jonction  $pn$  et perpendiculaires à la lumière émise par le laser.

3. Le coefficient de réflexion,  $R$ , d'un rayon lumineux d'un milieu d'indice de réfraction  $n_1$  vers un milieu d'indice  $n_2$  vaut  $R = \left( \frac{n_2 - n_1}{n_2 + n_1} \right)^2$ .



L'effet laser apparaît lorsque le courant circulant dans la jonction dépasse un certain seuil. Ce courant dépend fortement de la température ( $\approx T^3$ ). La lumière émise correspond à des photons d'énergie  $\approx E_g$ . Le rendement des lasers semi-conducteurs est très bon (30 % à 75 %) à la température de l'azote liquide, il l'est moins, 1 % à 10 %, à la température ordinaire.

On fabrique aussi des lasers à partir d'hétérojonctions. La première structure de ce type a été réalisée à base d'alliages d' $AsGa-Al_xGa_{1-x}As$ . Ils émettent entre 0,7 et 0,8  $\mu m$ . Toutefois, pour les communications à fibres optiques, il faut des lasers émettant plutôt dans une gamme de longueur d'onde comprise entre 1,1 et 1,6  $\mu m$ . On utilise alors des hétérostructures plus complexes comme l' $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}/InP$  ou l' $In_xGa_yAl_{1-x-y}As/In_{0,52}Al_{0,48}As$ .

Les lasers semi-conducteurs, dont les principales qualités sont leurs faibles coût et encombrement, ont des applications dans de nombreux domaines. Citons en particulier les communications, le stockage et le traitement de l'information, l'impression, la lecture de disques (audio, vidéo...), le médical, *etc.*

## EXERCICES

### Exercice 10.1

Le maximum de la bande de valence du silicium est situé en  $k = (0, 0, 0)$  et le minimum de la bande de conduction en :

$$k = \frac{2\pi}{a} [(0,85), 0, 0].$$

1. Calculer le moment transféré lors de l'excitation d'un électron du haut de la bande de valence vers le bas de la bande de conduction. On donne  $a = 5,43 \text{ \AA}$ .
2. Calculer le moment du photon. Peut-on assurer la conservation de l'impulsion ?
3. Même question pour l'AsGa pour lequel le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont situés en  $k = (0, 0, 0)$ .

### Exercice 10.2

On considère l'excitation d'un électron de la bande de valence vers la bande de conduction dans l'AsGa. La valeur du gap vaut  $E_g = 1,42 \text{ eV}$  à 300 K.

1. Donner l'expression de l'énergie cinétique de l'électron et du trou si l'énergie du photon incident vaut  $\hbar\omega > E_g$ .
2. Calculer numériquement ces énergies cinétiques, si le photon a une énergie  $\hbar\omega = 1,6 \text{ eV}$ , pour l'excitation d'un trou léger et l'excitation d'un trou lourd.

On donne respectivement  $m_e^* = 0,067m$ ,  $m_{lh}^* = 0,082m$  et  $m_{hh}^* = 0,45m$  pour la masse effective de l'électron, du trou léger et du trou lourd.

### Exercice 10.3

Une cellule solaire produit environ  $10 \text{ mW/cm}^2$ . La production électrique française est de l'ordre de  $100\,000 \text{ MW/an}$ . Calculer la surface des cellules solaires qu'il faudrait pour produire cette quantité d'électricité. Quelle serait la longueur d'un carré ayant cette surface ?

### Exercice 10.4

L'indice de réfraction de l'air est de 1 et celui de l'AgGa de 3,66.

1. Calculer le coefficient de réflexion d'un laser semi-conducteur en AsGa utilisant les plans de clivage du cristal comme réflecteur du résonateur.
2. Calculer l'angle de Brewster.

### Exercice 10.5

Un laser semi-conducteur AsGa a une longueur de cavité de  $150 \mu\text{m}$ .

1. Calculer la fréquence séparant deux modes de la cavité.
2. Quelle est, en eV, l'énergie de séparation de ces modes ?

L'indice de réfraction de l'AsGa est 3,66.

## CORRIGÉS

### Exercice 10.1

1. Le moment transféré vaut  $\hbar \Delta k = \hbar \frac{2\pi}{a} \times (0,85) = 1,03 \times 10^{-24} \text{ Ns}$ .
2. Un photon ayant l'énergie  $E_g$  a une longueur d'onde de  $1,1 \mu\text{m}$ . Son impulsion est  $\hbar k_{ph} = \hbar \frac{2\pi}{\lambda} = 6 \times 10^{-28} \text{ Ns}$ , soit 600 fois plus petite que le moment transféré. Elle est donc négligeable. Il faut donc faire intervenir des phonons pour assurer la conservation de l'impulsion.
3. Pour l'AsGa, la transition est directe et ne nécessite pas de phonons.

### Exercice 10.2

1. Soit  $E_e = \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m_e^*}$  l'énergie de l'électron et  $E_h = \frac{\hbar^2 k_h^2}{2m_h^*}$  l'énergie cinétique du trou. La conservation de l'impulsion s'écrit, en tenant compte du fait que

l'impulsion du photon est négligeable :

$$\hbar k_e = \hbar k_h \implies E_e m_e^* = E_h m_h^*$$

Nous poserons  $k = k_e = k_h$  dans la suite. La conservation de l'énergie s'écrit :

$$\hbar \omega = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*}$$

Ceci conduit à :

$$E_e = \frac{m_h^*}{(m_e^* + m_h^*)} (\hbar \omega - E_g) \text{ et } E_h = \frac{m_e^*}{(m_e^* + m_h^*)} (\hbar \omega - E_g)$$

2. Pour un trou léger, on a  $E_e = 0,99 \text{ eV}$ ,  $E_h = 0,81 \text{ eV}$  pour les trous légers et  $E_e = 0,157 \text{ eV}$ ,  $E_h = 0,023 \text{ eV}$  pour les trous lourds. Lorsque le trou est lourd, l'énergie cinétique est essentiellement emmenée par l'électron.

### Exercice 10.3

Il faut  $100 \text{ cm}^2$ , soit  $10^{-2} \text{ m}^2$  pour produire 1 W.

Par ailleurs,  $100\,000 \text{ MW} = 10^{11} \text{ W}$ . Il faudrait donc  $10^9 \text{ m}^2 = 10^3 \text{ km}^2$ . Il faut un carré de  $31,6 \text{ km}$  de côté pour avoir  $1000 \text{ km}^2$ . En fait, il faut une surface bien plus grande car le soleil ne brille pas durant tout le jour. De plus, la consommation varie en cours de l'année.

### Exercice 10.4

Le coefficient de réflexion est donné par  $R = \left( \frac{n_2 - n_1}{n_1 + n_2} \right)^2$ , où  $n_1$  et  $n_2$  sont les indices de réfraction. Pour notre exemple on a  $R = 0,326$ .

### Exercice 10.5

Si  $L$  est la longueur de la cavité résonante, il y a accord lorsque  $L = \ell \frac{\lambda}{2}$  où  $\ell$  est un nombre entier et  $\lambda$  la longueur d'onde dans le milieu. Cette dernière est reliée à la longueur d'onde  $\lambda_0$  dans le vide par  $\lambda = \lambda_0/n$ . L'espacement en fréquence entre deux ondes stationnaires est donné par  $\Delta\nu = \frac{c}{2nL}$ , où  $c$  est la vitesse de la lumière. Soit  $\Delta\nu = 2,7 \times 10^{11} \text{ Hz}$ .

L'énergie de séparation des modes vaut  $h\Delta\nu = 1,1 \text{ meV}$ . L'angle de réflexion totale est  $\theta_r = \arcsin\left(\frac{1}{3,66}\right) = 15,86^\circ$ .

## Chapitre 11

---

# Vers l'échelle nanométrique

La micro-électronique réalise des composants de plus en plus intégrés pour augmenter les performances et diminuer les coûts. Ceci nécessite de pouvoir graver des détails, dans les matériaux, de dimensions de plus en plus petites. Cette évolution n'est pas sans limite ne serait-ce que parce qu'il n'est pas possible de couper des atomes en deux sans changer leurs propriétés. Avant d'atteindre cette limite théorique, d'autres phénomènes, de nature quantique, apparaissent. Ils sont différents de ceux observés à plus grande échelle. Des variables continues peuvent devenir discontinues, de nouveaux phénomènes peuvent apparaître, des fonctionnements classiques disparaître, *etc.* La limite où des phénomènes quantiques se manifestent peut être qualifiée de « *mur quantique* ». Elle dépend du type de phénomène utilisé dans le dispositif, de la température à laquelle on opère, *etc.* Elle se situe généralement à des dimensions de quelques dizaines de nm.

La nano-électronique est le prolongement de la micro-électronique vers les faibles dimensions. Il est d'usage de définir celle-ci comme le domaine des dispositifs électroniques qui utilisent les propriétés de matériaux ayant des dimensions inférieures à environ 100 nm. Ces dispositifs nano-électroniques sont susceptibles d'avoir, pour certains paramètres, des fonctionnements de nature quantique différents du fonctionnement classique que l'on observe à des dimensions supérieures.

Les concepts de la mécanique quantique ont été pendant longtemps illustrés par des exemples que l'on pensait académiques : systèmes à une ou deux dimensions, boîte cubique, *etc.* Les progrès de la technologie (croissance par épitaxie par jets moléculaires. . .) et la possibilité de graver les semi-conducteurs à des échelles nanométriques, ont permis de fabriquer des systèmes qui en sont des réalisations directes. En effet, on peut maintenant fabriquer des dispositifs dans lesquels les électrons

sont confinés dans un plan (puits quantique, système 2D), dans une dimension (fil quantique, système 1D) ou dans un très petit volume (point quantique, système 0D).

L'évolution vers l'échelle nanométrique, avec ses espoirs et ses difficultés technologiques, est un domaine en pleine expansion. Il est caractérisé par une grande multidisciplinarité. De nombreuses pistes sont actuellement explorées car on ne connaît pas, d'ores et déjà, celles qui auront des débouchés industriels. Nous présenterons, dans ce chapitre, des notions élémentaires sur quelques aspects de ce sujet.

## 11.1 SYSTÈMES MÉSCOPQUES

Les systèmes mésoscopiques ont des dimensions intermédiaires entre celles des systèmes macroscopiques (un composant de  $1\,000\ \mu\text{m}^3$ , par exemple) et microscopiques (atomes, par exemple). Pour fixer les idées en ce qui concerne les dispositifs conducteurs ou semi-conducteurs, on peut les définir en regardant l'évolution de leur conductance en fonction de leurs dimensions. Pour un système macroscopique comme un parallélépipède de longueur  $L$ , de surface  $S$  et de conductivité  $\sigma$ , la conductance  $G$  est définie par la relation  $G = \sigma S/L$  ; c'est ce que l'on appelle un comportement ohmique. Ce comportement ohmique, caractéristique des systèmes macroscopiques, est satisfait lorsque ses dimensions sont bien supérieures aux trois longueurs caractéristiques suivantes :

- la *longueur d'onde de de Broglie* de l'électron, reliée à son énergie cinétique ;
- le *libre parcours moyen* des électrons qui représente la distance moyenne parcourue par l'électron entre deux collisions, ou, en d'autres termes, la distance au bout de laquelle la mémoire de son impulsion initiale est perdue ;
- la *longueur de relaxation de phase* qui est la distance à laquelle l'électron a perdu la mémoire de sa phase initiale.

Ces longueurs caractéristiques dépendent du matériau, de la température, du champ magnétique externe, etc.. Les systèmes mésoscopiques sont ceux pour lesquels une ou plusieurs dimensions du système sont inférieures, ou de l'ordre de grandeur des trois longueurs citées plus haut. Leurs dimensions peuvent varier de quelques nanomètres à plusieurs centaines de microns selon la nature du matériau et les conditions extérieures.

À cette échelle, le transport des électrons change de nature et l'on passe dans le *régime balistique*, i.e. dans un régime où les collisions des électrons se font plutôt avec la surface du matériau qu'avec un autre électron<sup>1</sup>.

---

1. Cette situation est analogue à celle d'un gaz enfermé dans un récipient lorsque sa pression diminue. À la pression ordinaire, le libre parcours moyen des particules est inférieur aux dimensions du récipient et la plupart des collisions se font entre deux molécules de gaz (il y a dans ce cas une viscosité dite à 2-corps). Lorsque l'on diminue la pression, le libre parcours moyen augmente et peut devenir bien supérieur aux dimensions du récipient. Dans ce cas, la plupart des collisions des particules se font avec les parois du récipient (la viscosité devient alors à 1-corps). Un tel gaz est qualifié de *gaz de Knudsen*.

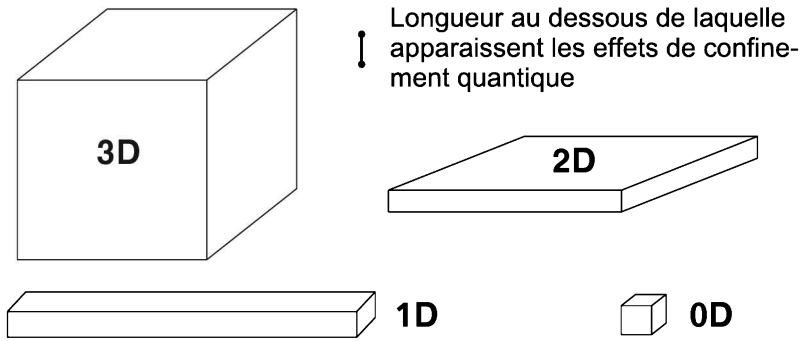
Donnons maintenant quelques estimations de ces différentes longueurs. La conductance, pour un métal ou un semi-conducteur, est gouvernée, à cause du principe de Pauli, par les électrons dont l'énergie est proche de celle de Fermi. La longueur d'onde de de Broglie qu'il faut considérer est donc celle d'un électron ayant le moment de Fermi. Pour un gaz de Fermi dégénéré, *i.e.* à basse température, elle est inversement proportionnelle à la densité d'électrons. Elle vaut par exemple  $\lambda \approx 35$  nm pour une densité d'électrons de  $5 \times 10^{11}/\text{cm}^2$ . Pour des semi-conducteurs de grande mobilité, le libre parcours moyen est du même ordre de grandeur que la longueur de relaxation de phase mais il est beaucoup plus petit pour ceux dont les porteurs ont une faible mobilité.

Comme les énergies mises en jeu dans les dispositifs mésoscopiques sont très faibles, la grande majorité des dispositifs développés au laboratoire fonctionnent à très basse température afin que l'énergie d'agitation thermique ( $\approx k_B T$ ) ne puisse créer spontanément des excitations. Pour que de tels dispositifs puissent être utilisés dans le domaine de l'électronique grand public, il faut par contre qu'ils puissent fonctionner à la température ordinaire.

Nous avons déjà étudié un système pour lequel les effets quantiques sont prépondérants : il s'agit de la diode tunnel (section 9.2).

## 11.2 Puits, fils et boîtes quantiques

Les méthodes de croissance de cristaux semi-conducteurs par épitaxie, comme l'épitaxie par jet moléculaire (MBE, molecular beam epitaxy) ou le dépôt en phase vapeur à partir d'organométalliques (MOCVD, metal-organic chemical vapor deposition) permettent de réaliser des dispositifs sur mesure dans lesquels les électrons sont confinés, dans une direction particulière, sur une très faible longueur. Pour cette direction particulière, les niveaux d'énergie sont discrets et bien séparés comme c'est le cas pour une particule confinée entre deux murs proches l'un de l'autre (*cf.* section 1.11.1). Lorsque ce confinement ne se fait que dans une dimension, alors que les deux autres dimensions ne sont pas contraintes sur de si courtes longueurs, on a pratiquement un gaz bidimensionnel d'électrons ; on dit que l'on a un *puits quantique*. Si le confinement sur de très faibles longueurs se fait sur deux directions perpendiculaires, alors que la troisième direction n'a pas cette contrainte, on réalise un *fil quantique*. Enfin, une minuscule boîte à 3 dimensions permet de créer une *boîte ou point quantique*. La figure 11.1 donne une représentation imagée des systèmes 3D, 2D, 1D et 0D, la notation  $nD$  signifiant qu'il y a  $n$  dimensions non confinées. Les puits, fils et boîtes quantiques sont une merveilleuse application du modèle de la boîte cubique que nous avons développé dans la section 1.11.1.



**Figure 11.1** Représentation des géométries 3D, 2D (puits quantique), 1D (fil quantique) et 0D (point quantique).

Nous avons déjà vu, lors de l'étude des hétérojonctions dans la section 9.6, qu'il est possible de réaliser un gaz d'électrons à deux dimensions. Les hétérojonctions sont des configurations très utilisées pour construire des systèmes de faible dimensionnalité.

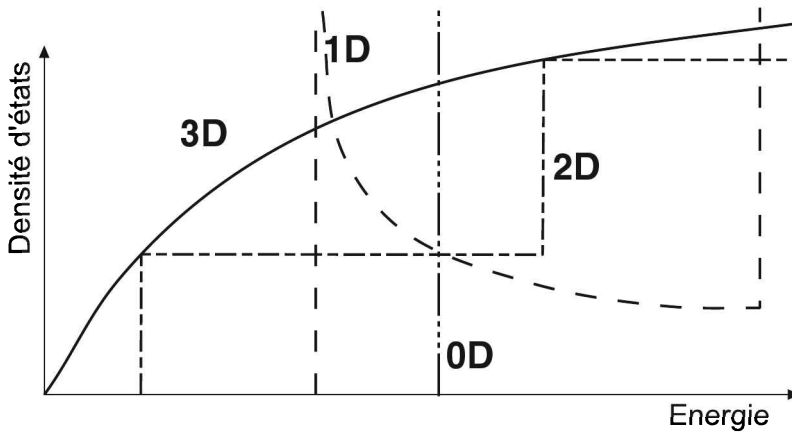
### 11.3 DENSITÉ DE NIVEAUX

Bien que nous ayons déjà évoqué ce point dans la section 6.5 à propos d'un gaz d'électrons libres, nous allons rappeler ici quelques résultats concernant la densité de niveaux d'une particule confinée dans une boîte de dimension  $n$ . La densité de niveaux  $\rho(E)$  d'un gaz d'électrons à 3 dimensions augmente proportionnellement à  $\sqrt{E}$  (figure 11.2). Elle vaut, pour une particule de spin  $\hbar/2$  dans une boîte cubique  $\rho(E) = (1/2\pi^2) (2m/\hbar^2)^{3/2} \sqrt{E}$ .

Le confinement des électrons impose des contraintes supplémentaires à la fonction d'onde électronique qui réduit le nombre d'états accessibles. Ceci a d'importantes conséquences sur les propriétés électroniques de ces systèmes.

Dans les puits quantiques (systèmes 2D), les électrons peuvent se déplacer dans le plan des couches mais restent confinés dans la troisième dimension. Ils n'ont donc que deux degrés de liberté. La densité de niveaux, lorsque l'on prend en compte toute les bandes, vaut  $\rho(E) = (m/\pi\hbar^2) \sum_n \Theta(E - E_n)$ , où  $n$  est le nombre quantique dans la direction de confinement,  $E_n$  les niveaux d'énergie pour cette dimension et  $\Theta(x)$  la fonction d'Heaviside ( $\Theta(x) = 0$ , pour  $x < 0$  et  $\Theta(x) = 1$ , pour  $x \geq 0$ ). Elle a le profil en marches d'escalier de la figure 11.2. Le bord de chaque marche correspond à un niveau du puits.

Pour un fil quantique (systèmes 1D), les électrons n'ont plus qu'un seul degré de liberté puisqu'ils sont confinés dans les deux autres dimensions. La densité de niveaux, lorsque l'on prend en compte toute les bandes, a pour expression



**Figure 11.2** Densités d'états en fonction de l'énergie (schématique) dans des structures 3D, 2D (puits quantique), 1D (fil quantique) et 0D (point quantique).

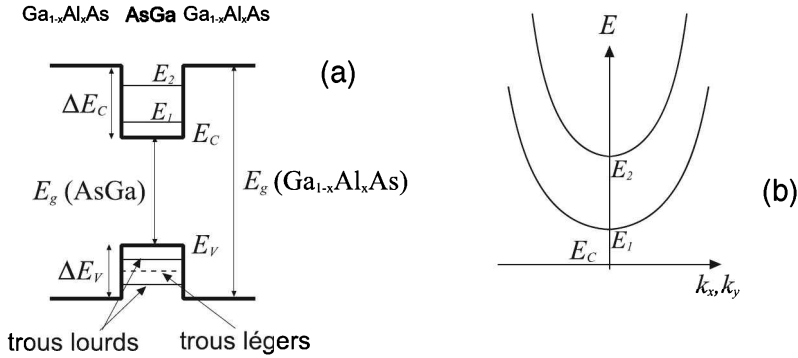
$\rho(E) = (1/\pi) (2m/\hbar^2)^{1/2} \sum_{n_1, n_2} (1/\sqrt{E - E_{n_1, n_2}}) \Theta(E - E_{n_1, n_2})$ , où  $n_1$  et  $n_2$  sont les nombres quantiques de la boîte à deux dimensions. L'allure de la densité de niveaux est présentée dans la figure 11.2. Elle est piquée sur chaque niveau caractéristique du fil.

Pour une boîte ou point quantique (système 0D), les électrons n'ont plus de degré de liberté et l'on retrouve les niveaux d'énergie de la boîte cubique. Ces derniers se trouvent à des valeurs fixes et la densité de niveau (figure 11.2) est un ensemble de pics très étroits qui s'écrit, si  $n_1, n_2, n_3$  sont les nombres quantiques de la boîte et  $E_{n_1, n_2, n_3}$  les niveaux d'énergie,  $\rho(E) = 2 \sum_{n_1, n_2, n_3} \delta(E - E_{n_1, n_2, n_3})$ , où  $\delta(x)$  est la distribution de Dirac.

## 11.4 PUIITS QUANTIQUES

Considérons un puits quantique très simple constitué à partir de deux semi-conducteurs : de l' $AsGa$  et l' $Ga_{1-x}Al_xAs$  ( $x \approx 0,3 - 0,35$ ) non dopés. Cette valeur de  $x$  permet d'avoir une barrière importante pour l'hétérojonction tout en conservant un gap direct. Ce couple de semi-conducteurs permet de créer des interfaces abruptes et donc de réaliser des structures d'empilement assez complexes. Un puits quantique consiste en une structure d' $AsGa$ , de largeur  $a$ , prise en sandwich entre deux couches de  $Ga_{1-x}Al_xAs$  ; c'est donc un dispositif constitué de deux hétérojonctions. Ceci est illustré dans la figure 11.3. Pour cet exemple, la transition est abrupte aux interfaces car les semi-conducteurs ne sont pas dopés. S'ils l'étaient, les bandes seraient courbées aux interfaces.





**Figure 11.3** (a) Schéma de bandes d'un puits quantique. (b) Énergie des électrons dans la bande de conduction.

Nous supposons que :

- la largeur  $a$  du puits est suffisamment grande ( $a \gtrsim 20 \text{ \AA}$ ) pour que la couche d'AsGa conserve les caractéristiques du cristal macroscopique,
- $a$  est suffisamment faible ( $a \lesssim 400 \text{ \AA}$ ) pour que  $a$  reste plus petit que le libre parcours moyen des électrons,
- la masse effective des électrons et des trous sont les mêmes dans l'AsGa et dans le Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As,
- Le puits quantique est orienté de façon à ce que le confinement soit dans la direction  $z$  et que les interfaces soient parallèles au plan de coordonnées  $xy$ .

Compte tenu de ces hypothèses, l'énergie d'un électron dans la bande de conduction peut s'écrire sous la forme  $E_n + (\hbar k_{\parallel})^2 / 2m^*$ , où  $\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{k}_x + \mathbf{k}_y$  est le vecteur d'onde des électrons dans la dimension  $xy$ . L'origine des énergies est prise au bas de la bande de conduction ( $E_c$ ). L'énergie  $E_n$  est, dans l'approximation la plus simple, celle d'une particule de masse  $m^*$  confinée entre deux murs séparés par une distance  $a$ , ou, de manière plus exacte, celle d'une particule confinée dans un puits de potentiel. Elle dépend du nombre quantique  $n$  qui est un entier ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ). Par conséquent, toutes les énergies de la bande de valence ne sont pas permises. La bande se décompose en sous-bandes qui correspondent aux différentes valeurs du nombre quantique  $n$ . Notons qu'il y a toujours au moins un niveau d'énergie dans le puits quelle que soit sa largeur (dans les limites fixées plus haut) et la hauteur de la barrière. Par ailleurs, comme la hauteur des barrières de confinement est finie, la fonction d'onde de l'électron confiné dans le puits décroît à l'extérieur de celui-ci comme  $\exp [(-2m^* E / \hbar^2) \ell]$ , où  $E$  est mesuré à partir de  $E_c$  et  $\ell$  est la distance à l'extérieur du puits. Ainsi, plus la masse effective est petite, plus la fonction d'onde électronique s'étend loin en dehors du puits.

Nous avons une situation analogue pour la bande de valence à ceci près que, pour l'*AsGa*, nous avons deux bandes de valence : celle des trous lourds et celle des trous légers. Pour chacune d'entre-elles, nous avons confinement des électrons dans la direction  $z$ , ce qui conduit à des niveaux d'énergie différents pour les trous lourds et pour les trous légers.

## 11.5 MULTIPUITS QUANTIQUES ET SUPERRÉSEAUX

Un *multipuits quantique* est constitué d'une succession alternée de couches de deux semi-conducteurs, *AsGa* et  $Ga_{1-x}Al_xAs$ , par exemple (figure 11.4). Lorsque les couches intermédiaires de  $Ga_{1-x}Al_xAs$  sont suffisamment épaisses ( $> 10$  nm), les fonctions d'ondes des électrons dans le puits de la bande de conduction de l'*AsGa* ne pénètrent pas suffisamment les barrières qui les confinent pour qu'il y ait un recouvrement appréciable avec la fonction d'onde du puits voisin. Cette faible extension de la fonction d'onde en dehors du puits implique une localisation de l'électron dans le puits dans lequel il se trouve. On peut alors traiter une telle structure comme la superposition de puits quantiques et il n'apparaît aucun nouveau niveau d'énergie.

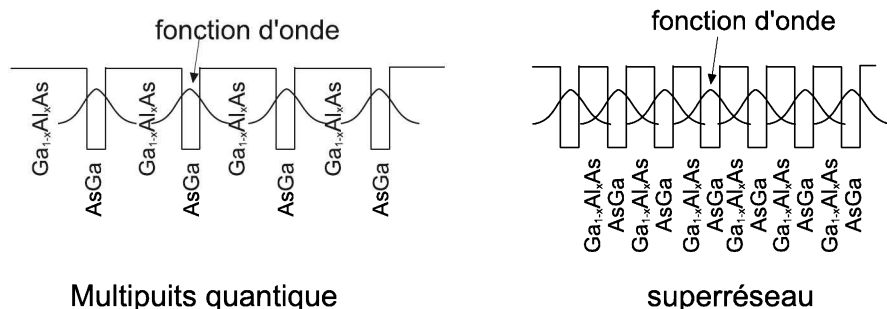


Figure 11.4 Schéma de bandes d'un multipuits quantique et d'un superréseau.

Si l'épaisseur de l'alliage  $Ga_{1-x}Al_xAs$  diminue dans la structure du multipuits quantique décrite ci-dessus, les fonctions d'ondes électroniques de chacun des puits d'*AsGa* (figure 11.4) se recouvrent et un électron peut être délocalisé sur l'ensemble de la structure. Cet état de chose ne doit pas nous surprendre. Nous avons un phénomène analogue à celui que nous avons vu pour un cristal dans lequel la présence d'une périodicité des d'atomes fait apparaître des bandes d'énergie et délocalise la fonction d'onde des électrons les moins liés sur tout le cristal. Pour cette raison, on appelle cette structure un *superréseau*.

Les multipuits quantiques et les superréseaux sont une succession de couches de semi-conducteurs  $A$  et  $B$ . Nous supposons que leurs gaps sont tels que  $E_g^{(A)} < E_g^{(B)}$ . Nous pourrions avoir, par exemple, de l'*AsGa* pour  $A$  et l'alliage ternaire  $Ga_{1-x}Al_xAs$

pour *B*. Les multipuits quantiques et les superréseaux appartiennent généralement à l'une des trois catégories énumérées ci-dessous.

- Le type I qui correspond au cas où les électrons et les trous sont confinés dans la couche *A*, *i.e.* celle qui assure le confinement. On l'observe dans le système multipuits ou superréseau composé de  $AsGa/Ga_{1-x}Al_xAs$  pour  $x < 0,3$  et pour une épaisseur de la couche *A* de  $a > 2$  nm.
- Le type IIA correspond au cas où les électrons sont confinés dans l'une des familles de couches et les trous dans l'autre. On peut réaliser une telle structure avec le couple  $AsGa/AlAs$  lorsque  $a < 2$  nm. On a en quelque sorte un système à gap spatialement indirect puisque les électrons et les trous ne sont pas confinés dans les mêmes régions de l'espace.
- Dans les systèmes de type IIB, formés avec le couple  $InAs/GaSb$  par exemple, il y a un très faible gap entre les électrons confinés dans la couche *A* et les trous dans la couche *B*.

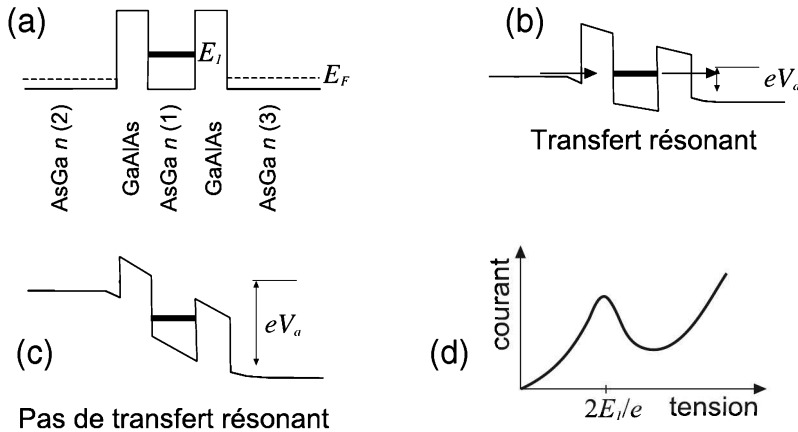
Les superréseaux dont nous avons parlé jusqu'ici sont constitués d'empilements de couches de matériaux semi-conducteurs différents. On peut aussi réaliser des superréseaux en dopant différemment des couches d'un même semi-conducteur. On peut ainsi former un superréseau en répétant une structure *nipi* dans laquelle les couches dopées sont séparées par une couche intrinsèque. La structure *nipi* est un empilement constitué d'une couche de semi-conducteur dopé *n*, d'une couche de semi-conducteur intrinsèque *i*, d'une couche dopée *p* et d'une couche intrinsèque *i*. Les caractéristiques du réseau sont données par la concentration du dopage et par la largeur des couches. Il est possible de modifier, de manière réversible, les propriétés des électrons et des trous du superréseau en l'illuminant avec des photons d'énergie et d'intensité convenables.

## 11.6 TRANSMISSION RÉSONANTE SOUS LA BARRIÈRE

Dans la section 9.6, nous avons étudié la diode tunnel qui présente, pour une certaine plage de tension, une résistance différentielle de nature quantique qui provient du passage, par effet tunnel, des électrons sous la barrière de potentiel de la jonction. Pour que cet effet tunnel soit possible, il faut qu'il y ait des états quantiques disponibles de l'autre côté de la barrière.

On peut aussi avoir une résistance différentielle négative avec des multipuits quantiques ou des superréseaux. Illustrons ce point avec un double puits quantique constitué d'une couche de faible épaisseur d' $AsGa$  faiblement dopé ( $AsGa\ n\ (1)$  dans la figure 11.5 (a)) prise en sandwich entre deux couches de  $GaAlAs$  intrinsèque. Cette structure est elle-même prise en sandwich entre deux couches épaisses d' $AsGa$  fortement dopées ( $AsGa\ n\ (2)$  et (3) dans la figure 11.5 (a)) qui permettent de prendre les contacts

ohmiques. Les paramètres de la structure sont choisis pour qu'il n'y ait qu'un seul niveau d'énergie dans le puits. Ceci conduit à une minibande dans le puits quantique.



**Figure 11.5** Schéma du transfert résonant. (a) Structure du double puits quantique. (b) Configuration lorsqu'il y a un transfert résonant. (c) Configuration lorsqu'il n'y a plus de transfert résonant. (d) Courant du dispositif en fonction de la tension appliquée  $V_a$ .

Lorsque l'on applique une tension  $V_a$ , le courant tunnel augmente, devient maximum lorsque  $V_a = 2E_l/e$  (figure 11.5 (b)) puis diminue (figure 11.5 (c)). La caractéristique de ce double puits quantique (figure 11.5 (d)) est analogue à celle de la diode tunnel.

## 11.7 LE BLOCAGE DE COULOMB

Nous allons maintenant étudier le blocage de Coulomb qui est un mécanisme permettant de réaliser des dispositifs dans lesquels on peut contrôler le passage des électrons un à un.

Les transistors à un seul électron et les dispositifs basés sur le blocage de Coulomb utilisent le fait que l'énergie nécessaire pour ajouter une charge élémentaire à un conducteur est inversement proportionnelle à sa capacité. Lorsque les dimensions sont très petites, la capacité est très faible et l'énergie électrostatique nécessaire pour charger le conducteur peut être plus grande que l'énergie thermique et que celle provenant d'une tension appliquée. Dans ce cas, aucun courant ne peut circuler.

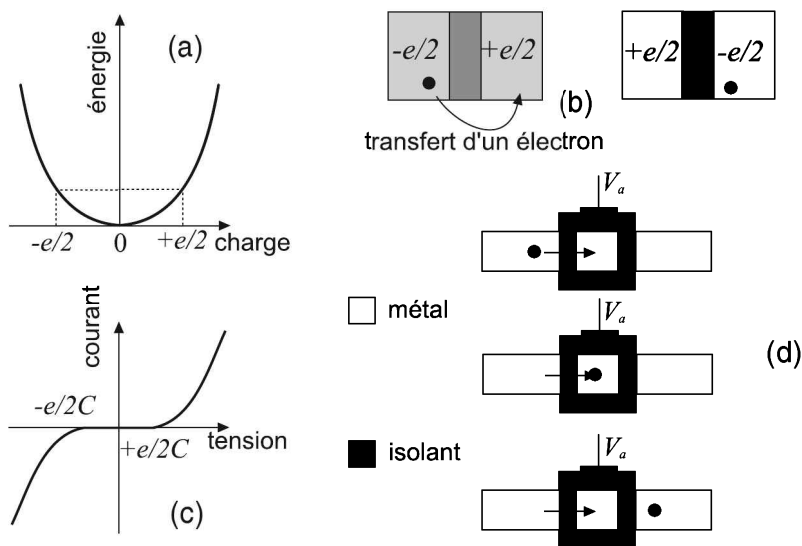
Toute particule a une charge qui est un multiple de la charge élémentaire  $e$ . Il y a une quantification de la charge et tout ensemble de particules chargées a une charge qui est un multiple de  $e$ .

Considérons maintenant un condensateur, *i.e.* deux plaques métalliques séparées par une couche d'isolant. Si l'on a une charge négative sur l'une des plaques, l'autre se

charge positivement. La charge électrique portée par l'une des électrodes du condensateur n'est pas quantifiée mais varie de manière continue. Considérons, pour s'en convaincre, le voisinage de la surface d'un cristal ; il est constitué d'ions positifs, fixes, et d'électrons. Si l'électron d'un atome situé près de la surface se déplace très légèrement vers celle-ci, cette dernière va devenir légèrement négative mais la quantité d'électricité induite n'est qu'une fraction de la charge de l'électron. Elle ne sera égale à la charge de l'électron que lorsque celui-ci sera localisé en surface. Comme le déplacement de l'électron peut être continu, la charge de la surface va varier de 0 à  $-e$ .

Revenons au condensateur. Nous allons maintenant supposer que l'épaisseur de l'isolant est très faible et nous placer à une température proche du zéro absolu pour que le système soit dans son état d'énergie le plus bas. Si l'on relie les électrodes à une source de courant, des électrons peuvent traverser l'isolant par effet tunnel. Il en résulte donc un courant électrique.

Supposons qu'il n'y ait initialement pas de charge électrique sur les électrodes ; c'est la configuration d'énergie minimum. Si un électron passe de l'électrode de gauche à l'électrode de droite, on obtient une configuration dans laquelle il y a une charge  $+e$  à gauche, résultant du départ de l'électron, et une charge  $-e$  à droite, résultant de son arrivée. Le passage à cette configuration demande de l'énergie et ne peut se produire spontanément. C'est ce que l'on appelle le *blocage de Coulomb*. La figure 11.6 (a) montre l'évolution de l'énergie du système en fonction de la charge sur l'une des électrodes (rappelons que cette charge est continue).



**Figure 11.6** (a) Énergie en fonction de la charge du système montré en (b). (c) Caractéristique lorsqu'il y a blocage de Coulomb. (d) Dispositif permettant de faire passer les électrons un à un.

Même si aucun électron ne passe d'une électrode à l'autre, la charge de chaque électrode fluctue par suite du mouvement des électrons dont nous avons parlé plus haut. Nous avons ainsi une certaine probabilité pour que la charge de l'électrode de gauche soit égale à  $-e/2$  et celle de droite  $+e/2$  (figure 11.6 (b)). Lorsque cette configuration est atteinte, nous voyons qu'elle a la même énergie (figure 11.6 (b)) que celle dans laquelle nous avons la charge  $+e/2$  sur l'électrode de gauche et  $-e/2$  sur l'électrode de droite (figure 11.6 (b)). La transition d'une configuration vers l'autre est possible et cela correspond au passage d'un électron par effet tunnel. Une fois qu'un électron a été transféré par ce mécanisme, le processus peut se reproduire. Les électrons peuvent ainsi passer un à un, par effet tunnel, au travers de la couche isolante.

Les physiciens qui ont découvert le blocage de Coulomb ont proposé une analogie pour comprendre l'accumulation de charge sur une électrode et le passage d'un électron. Le processus que nous venons de décrire ressemble à celui d'un robinet d'eau qui fuit lentement. D'abord la goutte grossit (la charge s'accumule sur l'électrode) puis, lorsqu'elle atteint une taille critique, elle tombe (l'électron passe par effet tunnel sur la seconde électrode).

Revenons au dispositif de la figure 11.6 (b), dans lequel un condensateur est constituée d'une très fine couche d'isolant et de deux électrodes métalliques. Si  $C$  est la capacité du dispositif, le blocage de Coulomb se manifeste par le fait qu'il n'y a pas de courant pour des tensions comprises entre  $-e/2C$  et  $+e/2C$ . Ceci est illustré dans la figure 11.6 (c) qui montre le courant en fonction de la tension. La loi d'ohm serait, dans cette représentation, une droite.

Nous allons terminer cette section par le dispositif dont la représentation académique est montrée dans la figure 11.6 (d). Il s'agit d'une boîte quantique, que l'on appelle aussi un point quantique puisqu'il est, du point de vue macroscopique, de dimension nulle. Cette boîte quantique, qui est l'électrode centrale du dispositif, est séparée par un isolant des deux électrodes situées de part et d'autre. Sur cet isolant il y a un contact électrique sur lequel on applique une tension  $V$ . Cette dernière permet de faire varier de façon continue la charge électrique du point quantique. Quand il n'y a pas de charge sur le point quantique, nous sommes dans la situation du blocage de Coulomb et aucun courant ne passe. Si l'on induit une charge  $+e/2$ , un électron va pouvoir passer, par effet tunnel, de l'électrode de gauche à l'électrode centrale par le mécanisme que nous avons décrit plus haut (*cf.* les deux figures en haut de la figure 11.6 (d)). Tant que cet électron sera dans le point quantique, aucun autre ne pourra passer à cause du blocage de Coulomb. Par contre, il va passer vers l'électrode de droite par effet tunnel selon le même mécanisme (figure inférieure de la figure 11.6 (d)). Il y a donc un passage corrélé des électrons de l'électrode de gauche vers l'électrode de droite qui rappelle un système d'écluses. Le dispositif de la figure 11.6 (d) ressemble à un transistor MOS car la tension appliquée sur l'électrode centrale contrôle le flux d'électrons ; la différence vient de ce que l'on contrôle ici le flux électron par électron.

## 11.8 DISPOSITIFS À UN ÉLECTRON

Les transistors CMOS actuels ont des grilles de l'ordre de 100 nm et mettent en jeu des dizaines de milliers d'électrons pour commuter. Si l'on diminue ce nombre, on diminue l'énergie nécessaire pour faire une commutation. La limite est de pouvoir effectuer cette commutation avec un seul électron. C'est l'idée du *transistor à un électron*. Plusieurs solutions sont possibles. L'une d'entre-elle est d'utiliser le *blocage de Coulomb* décrit plus haut.

Dans un dispositif basé sur le blocage de Coulomb, un minuscule îlot de charge, contenant typiquement quelques électrons  $N$ , est disposé entre deux électrodes. Le gap, qui est la différence entre le potentiel chimique du premier état électronique vacant ( $\mu_{N+1}$ ) et celui du dernier état occupé ( $\mu_N$ ), est égal à  $\Delta = e^2/C$ , où  $C$  est la capacité électrique de l'îlot. Si  $\Delta > k_B T$ , l'énergie d'agitation thermique, les électrons ne peuvent pas passer, par effet tunnel, d'une électrode à l'autre car il n'y a pas de niveau d'énergie intermédiaire disponible. Si l'on change le potentiel électrique de l'îlot, grâce à une grille métallique disposée près de celui-ci, on peut alors faire passer les électrons un à un d'une électrode (l'émetteur) à l'autre (le drain) selon le mécanisme décrit dans la section précédente. Pour qu'un tel dispositif puisse fonctionner à température ordinaire, la dimension de l'îlot doit être inférieure à environ 10 nm.

Des dispositifs de nanomémoires flash ont également été développées. Ils sont une miniaturisation des mémoires flash CMOS conventionnelles. L'information (0 ou 1) est stockée grâce à la présence ou l'absence d'un électron dans un point quantique. Ce type de mémoire demande une tension trente fois inférieure à celle d'une mémoire flash conventionnelle pour inverser son état. Si le temps de lecture ou d'effacement est du même ordre de grandeur que pour cette dernière, le temps d'écriture est beaucoup plus rapide. Un tel dispositif, qui demande peu d'énergie pour changer d'état, peut néanmoins être très facilement perturbé par le milieu extérieur<sup>2</sup>.

## 11.9 EFFET HALL QUANTIQUE

L'effet Hall classique a été décrit dans la section 7.5. Il avait été observé, en 1879 par Hall mais il fallu beaucoup plus de temps pour comprendre complètement le mécanisme. C'est un outil de caractérisation très utilisé des semi-conducteurs. Rappelons

---

2. On peut réaliser des mémoires plus robustes, vis à vis de la conservation de l'information, en répartissant celle-ci sur plusieurs points quantiques. Par rapport à une mémoire conventionnelle, un tel dispositif a l'avantage d'être moins sensible aux défauts. On peut se représenter simplement ceci en imaginant l'analogie suivante dans laquelle une mémoire conventionnelle est représentée par un ballon rempli d'air qui représente l'information. La mémoire constituée de nanopoints aurait alors comme équivalent le papier bulle. S'il l'on fait un petit trou dans le ballon, l'air s'échappe et l'information contenue aussi. Par contre, même si l'on crève quelques bulles, il en restera suffisamment pour garder l'information.

que l'on applique, à un échantillon, un champ électrique selon une direction et un champ magnétique perpendiculairement à cette dernière.

Plus récemment, en 1980, l'effet Hall quantique<sup>3</sup> a été mis en évidence. Trois conditions sont nécessaires pour l'observer :

- il faut disposer d'un gaz d'électrons à deux dimensions, ce que l'on sait faire en confinant les électrons dans une direction sur une épaisseur de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde des électrons ;
- il faut immerger le système dans un champ magnétique intense ;
- il faut maintenir le système à très basse température pour que les électrons restent dans les états quantiques les plus bas.

Pour la discussion qui va suivre, prenons la même configuration géométrique que celle de la section 7.5. Le gaz d'électrons à deux dimensions est dans le plan  $xy$  et la direction de confinement dirigée selon  $z$ . Nous supposons également que les porteurs de charge sont des électrons.

Avant de voir l'influence du confinement selon la direction  $z$ , nous allons faire quelques considérations générales sur les propriétés des électrons d'un matériau placé dans un champ magnétique. Sous l'action de ce dernier, les électrons décrivent des orbites dont le rayon dépend de l'énergie de l'électron. Ce rayon varie de manière continue puisque l'énergie des électrons de la bande de conduction est une variable continue à l'intérieur de la bande. L'énergie dans le plan  $xy$  est celle d'un oscillateur harmonique de fréquence  $\omega_c$ , la fréquence cyclotron ( $\omega_c = eB/m^*$ ). Selon la direction  $z$ , nous avons le mouvement d'un électron libre. On montre que l'on peut écrire les niveaux d'énergie d'un électron sous la forme  $E(\ell, k_z) = \hbar^2 k_z^2 / 2m^* + \hbar \omega_c (\ell + 1/2)$ , où  $\ell = 0, 1, 2, \dots$  est le nombre quantique associé à l'oscillateur harmonique. Il y a donc quantification de l'énergie dans le plan  $xy$ . Les niveaux d'énergie sont appelés *niveaux de Landau*. Ils forment des sous-bandes séparées de  $\hbar \omega_c$ . Pour l'*AsGa*, cette valeur est d'environ 17 meV.

Bien que le deuxième terme de l'équation ci-dessus ait la même forme que celle de l'énergie d'un oscillateur à une dimension, la situation est plus complexe. En effet l'oscillateur est à deux dimensions mais l'électron est dans un espace à 3 dimensions. Par ailleurs, alors que les états de l'oscillateur harmonique à une dimension ne sont pas dégénérés, la dégénérescence des niveaux de Landau est très grande<sup>4</sup>.

Si l'on confine maintenant les électrons, pour obtenir un gaz à deux dimensions, les niveaux d'énergie dans la direction de confinement, et par conséquent le rayon

3. Il a été découvert lors de l'étude des propriétés d'un transistor MOS placé dans un grand champ magnétique par K.von Klitzing, G.Dorda et M.Pepper.

4. En fait, elle est la même pour tous les niveaux de Landau. Son produit par le nombre de niveaux de Landau est égal au nombre de degrés de liberté du système en l'absence de champ magnétique.



des orbites possibles en présence du champ magnétique, sont également quantifiés. Cela conduit à des niveaux d'énergie discrets (*niveaux de Landau*). Leur particularité est que leur énergie, leur séparation et le nombre d'électrons qu'ils peuvent accueillir dépendent du champ magnétique appliqué. Si celui-ci est multiplié par deux, les niveaux de Landau sont deux fois plus espacés mais chacun peut accueillir deux fois plus d'électrons. La séparation en énergie entre deux niveaux de Fermi est très petite et représente, typiquement, le millième de la valeur du gap. Par conséquent, si l'on ne veut pas que certains électrons soient excités d'un niveau de Landau à l'autre, il faut que la température de l'échantillon soit très basse.

Pour le gaz d'électrons à deux dimensions, on observe que la résistance de Hall est égale à  $R = -h/e^2 M$ , où  $M = 1, 2, 3 \dots$  représente le nombre de niveaux de Landau occupés<sup>5</sup>. En variant le champ magnétique appliqué à l'échantillon, on observe que la résistance de Hall croît par paliers égaux à  $h/e^2$ . La quantité  $h/e^2 = 25\,812,8$  ohms ne dépend que de deux constantes fondamentales  $h$  et  $e$ . Elle peut être utilisée comme étalon de résistance. Rappelons à ce propos que la constante de structure fine de l'interaction magnétique est une autre constante fondamentale qui fait aussi intervenir  $h$  et  $e$ . Son expression,  $(1/4\pi\epsilon_0) (e^2/\hbar c) \simeq 1/137$ , est toutefois une quantité sans dimension.

## 11.10 SPINTRONIQUE

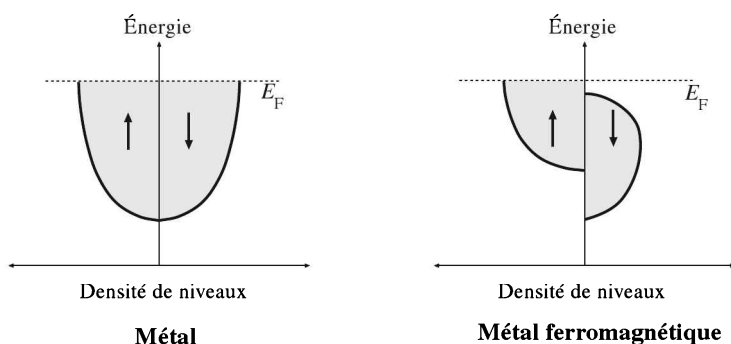
La majorité des dispositifs électroniques semi-conducteurs est basée sur les propriétés de transports des électrons et des trous. L'*électronique de spin*, ou *spintronique*, est un nouveau domaine en pleine expansion dans lequel on utilise les propriétés de transports dépendant du spin des électrons. Au lieu d'utiliser le couple électron-trou, la spintronique est basée sur la différence de spin entre les particules. La *magnétorésistance géante* est l'exemple le plus classique d'une utilisation des propriétés de spin des électrons. Une des applications est la réalisation de têtes de lecture des disques durs d'ordinateurs.

La circulation d'un courant électrique dans un métal est assurée par les électrons dont l'énergie est proche de l'énergie de Fermi. La densité de niveau est la même quelle que soit la projection du spin de l'électron ( $\uparrow$ ) ou ( $\downarrow$ ). Ceci est illustré schématiquement dans la figure 11.7. Dans un matériau ferromagnétique, comme le cobalt (Co), par exemple, il existe un champ magnétique interne très élevé (1,7 T) et les niveaux d'énergie des électrons dépendent du spin de celui-ci. Il en résulte que la densité d'électrons est différente pour les électrons de projection de spin ( $\uparrow$ ) et ( $\downarrow$ ). Le rapport

5. Il s'agit là de l'effet Hall dit « normal ». Il a également été mis en évidence, en 1982, un effet Hall dans lequel  $M$  est fractionnaire ( $M = 1/3, 2/3, 2/5, \dots$ ). Il s'agit de l'*effet Hall fractionnaire*. Son explication théorique est différente et plus complexe.

entre les densités de niveau est par exemple de 2,5 pour le cobalt au niveau de la mer de Fermi. On dit alors que les électrons de conduction sont polarisés en spin. Cette situation est schématiquement illustrée dans la figure 11.7.

Si l'on réalise un dispositif dans lequel deux couches de cobalt sont séparées par un métal non magnétique deux cas peuvent se présenter. Si les deux couches de *Co* ont des aimantations parallèles ( $\uparrow$ ), par exemple, les électrons passent facilement d'une couche à l'autre. Si, au contraire, les deux couches de *Co* ont des aimantations différentes, ( $\uparrow$ ) et ( $\downarrow$ ), par exemple, les électrons sortant de la première couche ne peuvent trouver de place dans la seconde et la résistance électrique devient élevée. On parle alors de magnétorésistance.



**Figure 11.7** Représentation très schématisée de la densité de niveau d'un métal et d'un métal ferromagnétique. Dans un métal le nombre d'électrons qui ont une projection de spin ( $\uparrow$ ) est égal, au voisinage de la mer de Fermi, au nombre de ceux qui ont une projection ( $\downarrow$ ). Ce n'est pas le cas pour le composé ferromagnétique schématisé ici pour lequel seuls les porteurs ( $\uparrow$ ) sont présents.

Pour certains matériaux, comme les manganites, les électrons sont complètement polarisés et, au voisinage du niveau de Fermi, il n'y a que des électrons d'un seul type de projection de spin, par exemple ( $\uparrow$ ). On obtient alors une magnétorésistance géante.

Parmi les dispositifs que l'on peut réaliser, signalons la vanne de spin qui a une fonction d'interrupteur. Elle est constituée d'une couche très faiblement coercitive qui suit toujours le champ magnétique extérieur, d'une barrière non magnétique et d'une couche fortement coercitive qui se retourne dans un champ magnétique fort. Lorsque les couches ont des aimantations opposées, la résistance est beaucoup plus forte que lorsque les aimantations sont parallèles. Un dispositif à effet tunnel peut être obtenu selon le même principe si la barrière intermédiaire (en métal ou semi-conducteur) est très mince. Un courant ne passe que si les deux couches magnétiques ont la même polarisation. Ceci permet de réaliser des interrupteurs ou des filtres de polarisation de spin.

L'électronique de spin en est à ses débuts et devrait permettre de réaliser à la fois des fonctions logiques et des mémoires. Un de ses avantages est une très faible dissipation de chaleur et une grande rapidité des dispositifs.

## 11.11 L'ÉLECTRONIQUE MOLÉCULAIRE

La micro-électronique réalise des motifs de plus en plus petits. La nano-électronique prolonge naturellement cette évolution en allant à des dimensions encore inférieures. Ce type d'approche, où l'on améliore les technologies de lithographie et d'intégration est appelée « top-down » car l'on va des grandes dimensions vers les petites de manière continue. Les dispositifs de taille nanométrique contiennent de moins en moins d'atomes même si ce nombre est encore très élevé. Il existe une autre approche, qualifiée de « bottom-up » dans laquelle on part de molécules pour construire des dispositifs par auto-assemblage de celles-ci. Ce domaine en est encore aux balbutiements et seules quelques fonctions très élémentaires ont été réalisées. Une des difficultés est l'interconnexion des dispositifs élémentaires et leur adressage. Il faut réaliser des fils moléculaires et être capable d'interconnecter des dispositifs entre eux.

L'électronique moléculaire est plus proche de la démarche suivie par la nature pour réaliser des objets complexes. L'espoir est de pouvoir fabriquer, dans le futur, de puissants dispositifs de traitement de l'information par ces méthodes d'auto-assemblage et d'auto-organisation. Celles-ci devraient demander des moyens technologiques moins onéreux que ceux vers lesquels tendent la micro et nano-électronique.

Le traitement de l'information par les dispositifs électroniques issus de la micro-électronique utilise une logique particulière basée sur l'algèbre de Boole. Pour les dispositifs réalisés par assemblage moléculaire, cette logique n'est sans doute pas la mieux adaptée. Ceci peut nécessiter d'introduire de nouveaux types d'architectures pour traiter l'information. Ainsi, bien que le cerveau humain ne traite pas l'information de la même manière que les calculateurs, il s'avère beaucoup plus efficace dans certaines situations. On est encore très loin d'avoir atteint des capacités cognitives analogues à celles du cerveau humain et il faudrait développer des dispositifs beaucoup plus intégrés que ce qui existe à présent. Pour donner un ordre de grandeur, si l'on représente la surface du plus petit transistor industriel actuel par une feuille de papier A4, il faudrait, pour atteindre des capacités cognitives analogues à l'être humain, réaliser des transistors dont la taille est celle d'un point sur cette page.

## 11.12 LA TECHNOLOGIE

Les progrès de la micro-électronique sont en grande partie dus à ceux de la lithographie qui permet de réaliser des motifs de dimensions de plus en plus petites. Un procédé lithographique nécessite une source de lumière, des masques, une optique et des résines. La lithographie optique est utilisée industriellement car elle permet d'insoler simultanément une grande surface du wafer. En effet, un faisceau d'électrons (lithographie électronique) permet de réaliser des motifs encore plus fins mais sa vitesse est incompatible avec les cadences d'un procédé industriel car l'insolation se

fait par balayage du faisceau comme dans un écran de télévision. La lithographie électronique est réservée à la recherche ou à la fabrication de masques. Des recherches sont toutefois menées actuellement pour réaliser des matrices de microcanons d'électrons permettant d'augmenter la vitesse d'insolation.

En lithographie optique, des sources de lumière sont disponibles dans l'ultraviolet à des longueurs d'onde de 248, 193 et 157 nm ce qui permet de réaliser des dispositifs avec des motifs de l'ordre de la centaine de nm. Pour des dimensions inférieures, il y a, au niveau industriel, un problème puisqu'il faut utiliser des rayons X ou de l'ultraviolet très lointain. Or, aux très courtes longueurs d'onde, il n'est plus possible de courber les rayons lumineux et l'on doit utiliser des miroirs. On est maintenant, en 2007, capable de graver le silicium avec une précision de trait de 65 nm. D'autres méthodes sont également possibles comme le « nano-imprint » dont le principe est de réaliser un tampon dans une résine polymère qui sera utilisé ensuite par pressage.

La réalisation de dispositifs nanométrique nécessite des techniques de fabrication mais aussi de caractérisation et de manipulation des objets obtenus. Celles-ci existent en partie dans les laboratoires mais beaucoup ne sont pas compatibles avec un procédé industriel de forte cadence. Par ailleurs, la nécessité de disposer d'un environnement extrêmement propre et de dispositifs de lithographie de plus en plus coûteux au niveau industriel pourrait être le frein majeur à l'évolution de la micro-électronique vers les petites dimensions.

## 11.13 CONCLUSION

De nombreuses études sont actuellement menées dans le domaine des dispositifs nanométriques. Ceci comprend la nano-électronique, qui est le prolongement naturel de la micro-électronique, et l'électronique moléculaire qui a pour but de construire des dispositifs par auto-assemblage de molécules. Une partie de la nano-électronique n'est que le prolongement de l'évolution des dispositifs de micro-électronique fonctionnant de manière classique et suit une « road map » élaborée au niveau international<sup>6</sup>. L'autre partie comprend les dispositifs mettant en jeu des phénomènes de nature quantique car différents de ce que l'on observe pour des dimensions supérieures. Un nouveau type de dispositif ne s'imposera que s'il amène un gain économique, une nouvelle fonctionnalité ou une amélioration notable des performances par rapport à la micro-électronique. Compte tenu des difficultés technologiques, il y a peu de chance que ces dispositifs remplacent d'un seul coup la micro-électronique. Au contraire, cette dernière restera le moteur de croissance de l'industrie électronique. Elle permettra,

---

6. Plusieurs scénarii sont envisagés pour la roadmap micro-électronique. Le plus optimiste table sur une précision de trait de 23 nm en 2016 alors que d'autres voient la fin de la micro-électronique conventionnelle vers 2012–2014 à cause de difficultés technologiques.

en incluant peu à peu des dispositifs quantiques dans ses composants, d'introduire progressivement l'usage de ceux-ci. L'électronique moléculaire, qui en est à un stade beaucoup moins avancé, suivra sans doute le même chemin. On s'attend donc à l'apparition de systèmes hybrides comprenant des dispositifs conventionnels micro-électroniques associés à des composants quantiques ou moléculaires.

## EXERCICES

---

**Exercice 11.1** Quelles doivent être les dimensions d'un point quantique cubique pour qu'un électron, situé sur le niveau fondamental, ne soit pas excité à la température ordinaire de 300 K ?

---

**Exercice 11.2** Calculer les 2 premiers niveaux d'énergie d'un puits quantique de type  $Ga_{1-x}Al_xAs-AsGa-Ga_{1-x}Al_xAs$  sachant que son épaisseur est de 11 nm et que  $m_e^* = 0,067m$ .

## CORRIGÉS

---

### Exercice 11.1

Les niveaux d'énergie d'une boîte cubique sont donnés par l'expression 1.9. Le niveau d'énergie de l'état fondamental à une particule vaut :

$$E_0 = 3 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \frac{1,121}{L^2(\text{nm})} \text{eV}$$

Pour que l'électron reste dans l'état fondamental et ne soit pas excité vers un état d'énergie plus haute par l'énergie d'agitation thermique, il faut que  $E_0 \gg k_B T = 0,026 \text{ eV}$ . Ceci conduit à  $L^2 \ll 43,1 \text{ nm}^2$  ou  $L \ll 6,6 \text{ nm}$ . En fait, comme l'électron a une masse effective qui est souvent inférieure à l'unité, cette valeur peut être plus grande.

---

### Exercice 11.2

On a :

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e^* L^2} = n^2 \times \frac{m}{m_e^*} \frac{0,374}{L^2(\text{nm})} \text{eV}$$

Si  $m_e^* = 0,067m$  et  $L = 11 \text{ nm}$ , on a  $E_1 = 46 \text{ meV}$  et  $E_2 = 185 \text{ meV}$ .

## Chapitre 12

---

# Du nanomonde aux applications

Ce dernier chapitre sera consacré à quelques aspects généraux des nanotechnologies en mettant l'accent sur la nano-électronique. Il complète le chapitre précédent, qui s'est intéressé aux mécanismes et dispositifs élémentaires dans ce domaine. Les nanotechnologies seront placées dans le contexte général de notre civilisation avec les implications futures que l'on peut imaginer mais qui ne sont sans doute qu'une modeste part de ce que l'homme réalisera demain. Une partie de ce qui sera décrit concerne aussi la micro-électronique et les microsystèmes qui existent déjà aujourd'hui et évolueront, grâce à la nano-électronique et aux nanotechnologies, vers une miniaturisation plus poussée.

Les nanotechnologies sont un ensemble de techniques qui permettent de détecter, d'observer, d'assembler et d'agir à l'échelle du nanomètre ou de la dizaine de nanomètres. C'est une petite échelle puisque 100 nm représentent une taille 1 000 fois plus petite que le diamètre d'un cheveu. C'est aussi beaucoup plus petit que la taille d'un globule rouge qui est 70 à 80 fois plus grand. Or 100 nm est la limite supérieure admise pour que l'on considère qu'un système est de taille nanométrique. Le domaine des nanotechnologies a pour but de mieux comprendre ce qui se passe à cette échelle et de réaliser des dispositifs ayant ces dimensions. Rappelons que toute matière est constituée d'éléments à l'échelle nanométrique, voire inférieure à celle-ci, puisqu'elle est formée d'atomes ou de molécules.

Les nanoparticules, qui ont des tailles de l'ordre du nanomètre ou de la dizaine de nanomètres, existent depuis longtemps et l'homme a parfois utilisé leurs propriétés sans le savoir. C'est le cas par exemple du noir de carbone entrant dans la fabrication de l'encre de Chine. C'est aussi le cas de certains verres colorés fabriqués il y a plus de 1 500 ans qui devaient leur couleur aux nanoparticules qu'ils contenaient. Le bois est lui-même un matériau composé de nanoparticules. Mais alors que

nos ancêtres utilisaient les propriétés spécifiques des nanoparticules sans le savoir, l'homme est aujourd'hui capable de faire du « sur-mesure » dans ce domaine, d'agir sur celles-ci, de les fabriquer à la demande et de les assembler. Des crèmes solaires, des produits cosmétiques, des verres autonettoyants, des vernis de peinture automobile anti-rayures, certains additifs d'aliments, etc. contiennent aujourd'hui des nanoparticules. Les exemples que nous venons de citer sont des objets inertes mais il existe et existera bientôt une foule d'autres systèmes actifs contenant notamment des composants électroniques nanométriques donnant de l'intelligence à l'ensemble. La nouveauté vient de ce que l'homme est aujourd'hui capable d'interagir à cette échelle et de fabriquer des objets ayant au moins une dimension de taille nanométrique. Il le faisait déjà depuis longtemps en fabriquant des films minces ou des dépôts de couches minces. La différence est que d'acteur passif il est devenu un acteur actif. Les progrès de la science permettent maintenant aussi de manipuler des atomes, de les assembler, de les déplacer, choses qui semblaient impossibles il y a encore quelques décennies.

Les dispositifs micro-électroniques ne vont pas, du jour au lendemain, être remplacés par des composants nano-électroniques. Il n'est en effet pas clair que toutes les fonctions actuelles réalisées par ces dispositifs puissent être facilement et économiquement réalisées avec des composants issus de la nano-électronique. L'évolution va d'abord être vers des systèmes hybrides où l'on associe l'électronique à d'autres fonctions : mécaniques, optiques, fluidiques. On pourra également marier l'inerte et le vivant en couplant micro et nano-électronique avec des cellules ou des organes, par exemple. Pour qu'un dispositif nano-électronique ait un intérêt commercial, il faut qu'au moins l'une des trois propriétés suivantes soit remplie :

- il apporte une nouvelle fonctionnalité à un coût acceptable ;
- il fait baisser les coûts ;
- il accroît notablement les performances à coût égal ou légèrement supérieur.

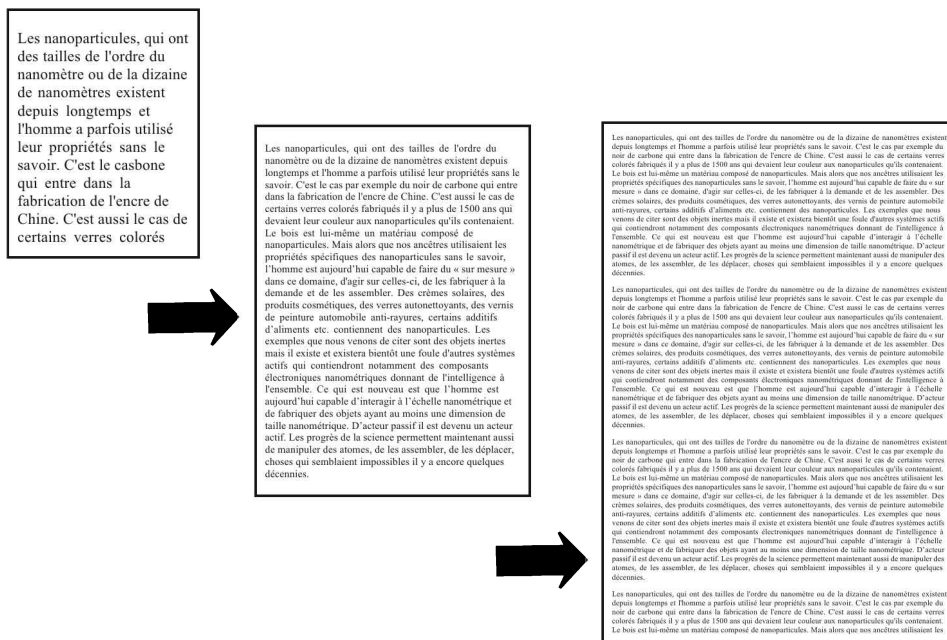
## 12.1 LA NANO-ÉLECTRONIQUE : POURQUOI ?

L'homme moderne souhaite pouvoir se décharger des tâches fastidieuses pour se consacrer à d'autres qui lui paraissent plus intéressantes. Il a aussi besoin d'aide pour se simplifier la vie. Cela revient donc à reporter une part de l'intelligence humaine sur la machine. Il a besoin pour cela de systèmes de traitement de l'information de plus en plus puissants et de stockage de données de plus en plus performants. On estime que la demande de stockage de l'information, toute nature confondue (livres, musique, vidéo...) est passée, pour les particuliers, de 30 Go en 2001 à 125 Go en 2010, soit un facteur 4. Pour les entreprises cette évolution est encore plus grande : un facteur 50 en une décennie. Les systèmes nomades, c'est-à-dire sans liaison directe avec le réseau électrique, donc portables, ont envahi la vie de tous les jours (téléphones portables, smartphones, ordinateurs portables, lecteurs de musique ou de vidéo). Le

fait nouveau survenu en à peine plus d'une décennie, c'est que les individus souhaitent communiquer à tout moment et en tout lieu. Ce qui était avant l'apanage d'une minorité devient de plus en plus le besoin d'un grand nombre d'individus. Pour répondre à cela, les systèmes de traitement de l'information et de la communication doivent être de plus en plus compacts, puissants et performants d'où la nécessité d'embarquer une électronique de plus en plus sophistiquée. Ces systèmes nomades nécessitent de l'énergie pour les faire fonctionner. Les piles ou batteries qui les alimentent doivent avoir une grande densité d'énergie afin de rester légers mais assurer une autonomie importante au dispositif qu'ils alimentent. La stratégie est donc double, d'une part augmenter la densité d'énergie par unité de masse et de volume des batteries, d'autre part développer une électronique de basse consommation, ce qui demande des composants réalisés avec une technologie dont les dimensions sont de plus en plus petites. C'est la raison pour laquelle les processeurs dédiés aux ordinateurs portables sont gravés plus finement que ceux dédiés aux ordinateurs fixes : ils consomment moins d'énergie ! Au niveau des sources d'énergie, l'utilisation de nanomatériaux permet d'augmenter notablement les performances des batteries : leur densité d'énergie par unité de masse et de volume, leur cyclabilité, leur durée de vie mais aussi leur coût.

L'évolution vers des dimensions de plus en plus petites (on peut maintenant graver le silicium à l'échelle industrielle à des dimensions de 22 nm) a trois raisons principales. Plus petit veut en effet dire plus rapide, moins consommateur d'énergie et une plus grande densité de transistors par unité de surface. Il en résulte au total une plus grande puissance de traitement ou de stockage de l'information. Comme le transport de l'information nécessite moins d'électrons, il faut moins d'énergie. La contrepartie est une plus grande sensibilité au bruit thermique, ce qui est une des limites à la miniaturisation des dispositifs. En effet, on peut diminuer la consommation d'énergie pour chaque fonction réalisée mais pas indéfiniment. Comme la densité de composants augmente elle aussi fortement, et en général plus vite que la diminution d'énergie de chacun des composants, il y a un dégagement d'une plus grande densité de chaleur par unité de volume, qu'il devient difficile d'évacuer par les techniques habituelles, et des technologies spéciales doivent être mises en œuvre. Évacuer la chaleur de composants de plus en plus petits mais en plus grand nombre par unité de surface est un des problèmes majeur à résoudre dans l'évolution de la micro-électronique vers des dimensions nanométriques. De plus, la fabrication de ces circuits se fait grâce à des techniques de lithographie qui demandent une précision sans cesse accrue dans la finesse du trait, ce qui est un problème ardu à résoudre nécessitant des innovations dans les procédés. Certaines ont été découvertes et mises en œuvre mais il reste encore un énorme travail à faire dans le futur. Dans le même temps, on utilise des tranches de silicium (*wafers*) de plus en plus grandes sur lesquelles seront construits les circuits intégrés. On fabrique donc de plus en plus de transistors sur un substrat de plus en plus grand. C'est ce que schématise la figure 12.1, qui prend comme analogie une feuille de papier de plus en plus grande sur laquelle on écrit de plus en plus petit.





**Figure 12.1** Ce schéma illustre l'évolution de la micro-électronique en prenant comme analogie une feuille de papier qui représente le substrat sur lequel on grave des motifs de plus en plus petits (on imprime sur la feuille des caractères de plus en plus petits).

On estime que le marché mondial potentiel de la nano-électronique représente des centaines de milliards d'euros. C'est dire tout l'intérêt que portent les industriels de l'électronique à ce domaine en plein développement. Partout où il y a des microprocesseurs et des mémoires pour traiter ou stocker l'information, il y a des possibilités de développement pour la nano-électronique. Mettre de l'intelligence dans tous les systèmes devient un objectif et la miniaturisation extrême est un moyen d'y parvenir. C'est possible grâce à une baisse énorme des coûts, due en partie à un traitement collectif, c'est-à-dire en parallèle, des tranches de silicium sur lesquelles on réalise les circuits intégrés, et à un fort accroissement des performances. Rappelons que la première loi de Moore, proposée en 1965, prévoit que la puissance des microprocesseurs double tous les 18 mois. Par contre, le coût de fabrication double lui-même tous les 3 ans. L'investissement de la dernière usine d'Intel dédiée à la fabrication de microprocesseurs avec une précision de trait de 22 nm dépasse les 5 milliards de \$. Malgré cela, on a une diminution rapide du coût de l'électronique. Un million de transistors valaient 75 000 € en 1973, soit le prix d'une maison. En 1981, le prix était descendu à 450 €, soit le prix d'un poste de télévision. En 1990, il était de 5 € (une pizza) et, en 2005, il n'était plus que de 0,005 €, soit le prix d'une feuille de Post-it. Aujourd'hui, un transistor élémentaire ne vaut pas grand-chose et c'est la raison pour laquelle la plupart

des objets modernes qui nous entourent utilisent des microprocesseurs contenant un grand nombre de transistors : pèse-personne, machine à café, réveil électronique, ascenseur, automobile, etc. Chaque année, on fabrique, au niveau mondial, plus de transistors élémentaires que l'agriculture ne produit de grains de riz ! Il a été estimé en 1997, c'est-à-dire il y a déjà une quinzaine d'années de cela, que le nombre de transistors en service était, ramené par habitant, d'environ 40 millions, soit environ 4 millions de transistors produits par an depuis les débuts d'une fabrication intensive de ceux-ci. Or, comme cinq grains de riz pèsent environ 1 g, 4 millions de grains de riz représenteraient 800 kg de riz par personne, ce qui correspond à un tonnage global bien supérieur à la production annuelle mondiale réelle de riz.

Cette baisse rapide des coûts a permis à la micro-électronique d'envahir la vie quotidienne. Ainsi, une carte bancaire possède une puce contenant environ 2 millions de transistors et même une modeste cafetière électrique en contient une dizaine de milliers. Les voitures contiennent plusieurs dizaines de puces et plus de 10 millions de transistors. Une automobile possède aujourd'hui plus d'électronique que les premiers Airbus ! Pour quantifier les progrès accomplis, disons qu'entre l'ordinateur ENIAC<sup>1</sup>, de 1950, et l'organiseur de poche Jordana des années 2000, le volume du système a été divisé par  $10^8$  et la puissance multipliée par  $10^8$ . Plus de 10 ans après, les performances se sont encore accrues. Entre 1971 et aujourd'hui, le nombre de transistors sur un microprocesseur est passé de 2 300 à 3 milliards. Le stockage a aussi fortement progressé. C'est en 1967 qu'IBM a introduit la première disquette et, en 1976, une disquette de  $5\frac{1}{4}$  pouces n'avait une capacité de stockage que d'une centaine de kilo-octets alors qu'il est aujourd'hui courant pour un particulier d'avoir des disques de 1 à 2 To, soit une capacité 10 à 20 millions de fois supérieure.

## 12.2 VOIR ET MANIPULER L'INFINIMENT PETIT

Beaucoup de scientifiques ont rêvé à des machines de taille si petite qu'elles pourraient explorer le corps humain et intervenir sur celui-ci pour soigner certaines pathologies. On imagine ainsi des microrobots capables de circuler dans les artères pour éliminer le mauvais cholestérol. En 1966, *Le voyage fantastique*, un film de Richard Fleischer, montrait comment cinq chirurgiens et leur véhicule avaient été miniaturisés pour une heure et injectés dans le corps d'un savant tchèque victime d'un attentat et dont le cerveau avait été endommagé. Il leur fallait détruire le caillot de sang qui s'était formé dans ce dernier.

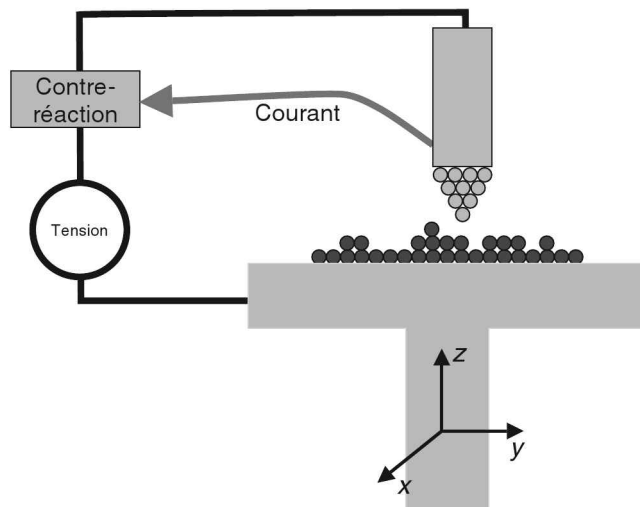
1. L'ENIAC (*Electronic Numerical Integrator And Computer*), imaginé et proposé à l'armée américaine en 1943 par J. Presper Eckert et J. Mauchly, a été terminé en 1946. Il pesait 30 tonnes, avait 19 000 tubes à vide, pour une puissance de 140 kW et occupait une surface au sol de 72 m<sup>2</sup>. Il était capable de faire 330 multiplications par seconde et a fonctionné jusqu'en 1955.

En 1959, Richard Feynman avait déjà fait un discours remarqué devant la Société américaine de physique affirmant qu'il y a « beaucoup d'espace en bas » et qu'aucune loi physique n'interdit de manipuler des objets minuscules, voire des atomes, pour stocker de l'information et créer des systèmes permettant d'assurer des fonctions particulières. Malheureusement, à cette époque, si l'idée existait, les outils pour la mettre en œuvre n'existaient pas. Après son discours, Richard Feynman avait offert deux prix de 1 000 \$ chacun. L'un à celui qui construirait un moteur électrique de quelques millimètres, l'autre à celui qui pourrait loger toute l'information contenue dans la page d'un livre sur la surface d'une tête d'épingle. Si le moteur électrique fut immédiatement réalisé, il a fallu attendre 26 ans (1985) pour que le second objectif soit atteint.

Pendant longtemps, beaucoup de physiciens pensaient que l'on ne pourrait pas « voir » ni déplacer des atomes et que toute l'information que l'on pouvait obtenir à leur sujet resterait indirecte. Une découverte va révolutionner ce point de vue en 1981. Il s'agit du microscope à effet tunnel (STM : *Scanning Tunneling Microscopy*) inventé par G.K. Binnig et H. Rohrer, d'IBM Zurich. Ces scientifiques ont obtenu le prix Nobel en 1986 pour cette découverte. Dans un microscope à effet tunnel, une pointe fine, constituée d'un ou de quelques atomes, se déplace à une distance de quelques angströms de la surface d'un solide. Grâce à l'effet tunnel, des électrons de la pointe peuvent passer entre la pointe et la surface et permettent de faire une image des atomes grâce à leur nuage électronique. Le microscope à effet tunnel permet ainsi de cartographier une surface avec une précision meilleure que celle de l'atome. Le STM s'appliquait aux matériaux conducteurs ou semi-conducteurs mais il a vite été généralisé (microscope à force atomique et autres) à des matériaux isolants.

Le principe de la STM est illustré dans la figure 12.2. Une pointe conductrice très fine ayant un seul atome à l'extrémité est amenée à une distance d'environ 1 nm de la surface de l'échantillon qui est supposé être conducteur ou semi-conducteur. À cette faible distance, des électrons peuvent passer par effet tunnel de l'échantillon à la pointe et vice versa selon le signe de la tension appliquée entre les deux. Le courant tunnel diminue de manière exponentielle lorsque la distance entre la pointe et l'échantillon augmente. Généralement, une variation de la distance de 10 % (environ 0,1 nm ou 1 Å) conduit à une variation d'un ordre de grandeur du courant tunnel. Cette forte dépendance donne une sensibilité élevée dans le sens vertical (elle peut être d'environ 0,01 nm, soit le dixième d'angström). Un STM peut être utilisé de deux façons différentes : soit la pointe reste à une distance constante de l'échantillon, soit elle se déplace pour que le courant tunnel reste constant. Dans le premier mode, la pointe balaye l'échantillon tout en restant dans un plan horizontal. Le courant tunnel varie alors selon la topographie de la surface. Ce mode permet des mesures rapides mais requiert une surface lisse. Dans le mode où l'on garde le courant constant, on utilise un dispositif de contre-réaction pour ajuster en permanence la distance entre la pointe et l'échantillon, afin de garder constant le courant tunnel. Ce mouvement se

fait grâce à des cristaux piézoélectriques. Le mode à courant constant est plus lent que le mode à distance constante mais il a l'avantage de permettre de mesurer les surfaces irrégulières. Un STM permet de cartographier la topographie d'une surface mais on peut aussi utiliser le courant tunnel pour obtenir des informations sur la densité d'états électroniques à la surface. La résolution spatiale d'un STM dans le plan horizontal est d'environ 0,2 nm.



**Figure 12.2** Principe d'un microscope à effet tunnel (STM, *Scanning Tunneling Microscopy*).

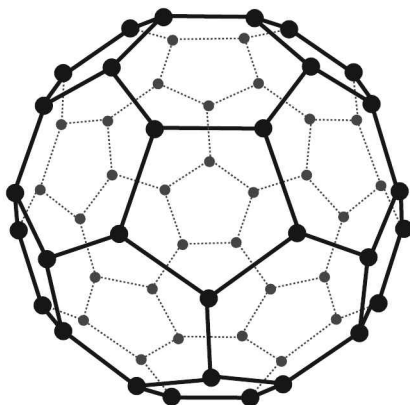
Il a fallu toutefois attendre 1990 pour que D. Eigler et E. Schweizer montrent qu'il est possible de déplacer des atomes. Ils ont ainsi déplacé des atomes de xénon un par un pour dessiner le sigle IBM sur une surface de nickel.

## 12.3 NOUVELLES FORMES DE CARBONE

Des découvertes importantes ont eu lieu pendant les trois dernières décennies avec un impact important pour le développement des nanotechnologies.

En 1985, H. Kroto, R. Curl et R. Smalley découvrent, dans les suies formées par un arc électrique entre deux électrodes de carbone, des composés formés de 60 atomes de carbone et arrangés selon la structure d'un ballon de football. Ils ont obtenu en 1996 le prix Nobel de chimie pour cette découverte. Ce  $C_{60}$ , est un polyèdre régulier de diamètre 0,7 nm dont les faces sont des hexagones et des pentagones. Il y a au total 12 pentagones et 20 hexagones. La figure 12.3 montre l'aspect du  $C_{60}$ . Aucun des pentagones n'a un côté en commun. Cette forme ressemble à celle d'un ballon de football européen. C'est une cage dans laquelle on peut placer des atomes. La moitié d'un  $C_{60}$  ressemble au dôme géodésique de l'architecte Buckminster Fuller qui était

le pavillon des États-Unis à l'Exposition universelle de Montréal, en 1967. Plusieurs autres composés de ce type ont été très vite mis en évidence. Ils appartiennent à une famille dénommée fullerènes. Le  $C_{60}$  avait été prévu par E. Osawa en 1970.



**Figure 12.3** Représentation schématique de la molécule de  $C_{60}$ .

En 1991, au Japon, I. Ijima met en évidence, toujours dans les suies de carbone, l'existence de nanotubes de carbone. Ces tubes, d'un diamètre de 1,5 nm, peuvent avoir une longueur pouvant atteindre plusieurs micromètres. Plusieurs tubes peuvent parfois être emboîtés les uns dans les autres. Ces matériaux peuvent, selon leur structure, avoir un comportement métallique ou semi-conducteur. Ils sont déjà utilisés dans les dispositifs d'électronique moléculaire, par exemple, et leur importance est croissante dans le domaine des nanotechnologies. Les nanotubes de carbone ont d'excellentes propriétés mécaniques et thermiques. Leur conductivité thermique est par exemple 8 fois meilleure que celle du cuivre et ils sont aussi durs que le diamant, ce qui permet de faire des fibres d'une résistance mécanique exceptionnelle (le module d'Young est 5 fois celui de l'acier). Les principales applications des nanotubes de carbone sont indiquées dans la figure 12.4.

Le graphène est une autre découverte importante, faite en 2004 par A. Geim et ses collaborateurs. Il s'agit d'un cristal bidimensionnel formé d'un réseau hexagonal. Le graphite, qui est forme allotropique bien connue du carbone, est un empilement de graphène. Le graphène a des propriétés mécaniques et électroniques remarquables présentant un grand potentiel pour des applications. Ces propriétés sont particulièrement appropriées pour pouvoir développer des applications dans le domaine des hautes fréquences (communications, radars, imagerie, etc.). Dans le graphène, les porteurs de charge ont d'excellentes caractéristiques et il a une forte absorption optique, ce qui est d'un grand intérêt dans le domaine de l'optoélectronique et de la photodétection. Il reste néanmoins de la recherche et du développement à faire avant d'avoir des applications au niveau industriel.

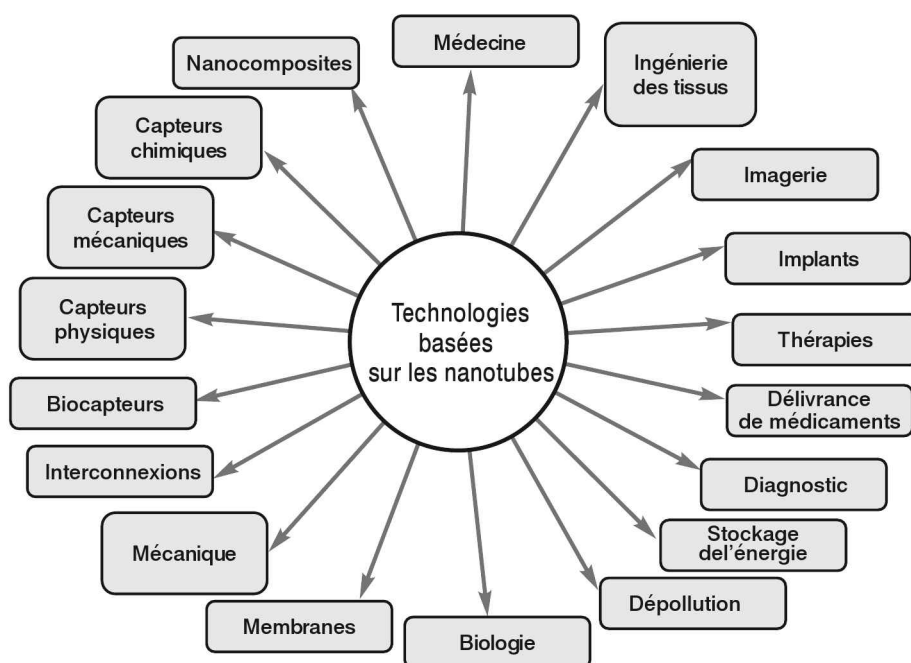


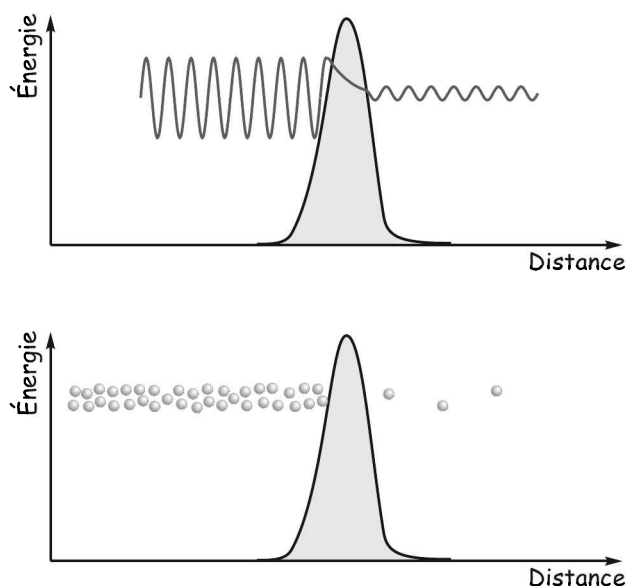
Figure 12.4 Quelques applications des nanotubes de carbone.

## 12.4 À L'ÉCHELLE DU NANOMÈTRE, LE MONDE CHANGE

À des échelles très petites, les effets de surface deviennent plus importants que les effets de volume. Ceci conduit à des modifications du comportement des systèmes. À titre d'exemple, considérons une mousse de fils de fer dont le diamètre a la taille d'un cheveu. Déposée sur l'eau, elle flotte ; une sphère du même métal et du même poids posée sur l'eau coulerait. Un autre exemple montrant l'augmentation considérable de la surface dans les systèmes micro ou nanoscopiques est de considérer un cube de 10 cm de côté rempli d'eau. Il contient 1 litre de ce liquide. Si nous subdivisons ce volume en nanocubes de 1 nm d'arête, il y aura  $10^8 \times 10^8 \times 10^8 = 10^{24}$  nanocubes, soit 1 million de milliards de milliards. Alors que la surface du cube initial était de  $600 \text{ cm}^2 = 0,06 \text{ m}^2$ , la surface de l'ensemble des nanocubes est de  $6 \text{ km}^2$ .

Aux effets de surface s'ajoutent des effets de nature purement quantique comme l'effet tunnel, qui permet à une particule comme l'électron de traverser des barrières de potentiel très minces alors que c'est impossible classiquement. L'effet tunnel est schématiquement illustré dans la figure 12.5. En haut de cette figure, une onde traverse par effet tunnel la barrière de potentiel. Dans la partie basse de la figure, un flux de corpuscules frappe la barrière et quelques-uns d'entre eux la traversent par effet tunnel. En fait, une particule peut se comporter soit comme une onde, soit comme

un corpuscule selon les conditions. Une onde électromagnétique de courte longueur d'onde peut se comporter comme un corpuscule (photon) ; c'est ce qui est observé dans l'effet Compton par exemple. De même, des corpuscules comme l'électron peuvent être diffractés ou conduire à des interférences comme le ferait une onde. Il est toutefois important de noter qu'une particule ne peut pas se comporter comme une particule et une onde en même temps. C'est l'un ou l'autre.

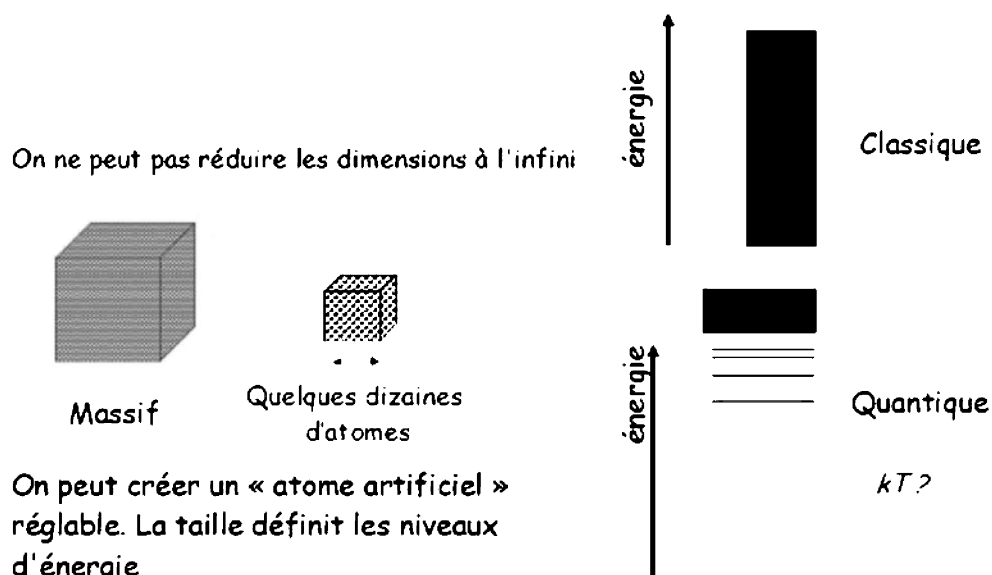


### Transmission par effet tunnel

**Figure 12.5** Représentation schématique de l'effet tunnel. En haut pour une onde, en bas pour des corpuscules.

Les atomes ont des niveaux d'énergie quantifiés, ce qui conduit à la structure de la matière qui nous entoure. Comme on peut le voir schématisé dans la partie droite de la figure 12.6, pour une particule libre dans une boîte cubique, les niveaux d'énergie peuvent être considérés comme continus pour un système macroscopique classique. Ce n'est plus le cas lorsque cette boîte a des dimensions de l'ordre de la dizaine de nanomètres. Les niveaux d'énergie les plus bas sont alors bien séparés. Pour de très faibles dimensions, la séparation des premiers niveaux peut être supérieure à l'énergie d'agitation thermique  $kT$ , où  $k$  est la constante de Boltzmann et  $T$  la température du milieu. Dans la zone de transition entre classique et quantique, *i.e.* pour des dimensions intermédiaires, la séparation des niveaux les plus bas sera inférieure ou de l'ordre de  $kT$  si bien que, pour observer le système dans son état fondamental, il faudra le placer à très basse température. Les effets quantiques qui nous intéressent

ne pourront donc être observés que si l'énergie d'agitation thermique est négligeable comparée à la séparation des niveaux d'énergie. Ceci implique un fonctionnement du dispositif à basse température. Ceci n'est bien sûr pas acceptable pour des systèmes électroniques destinés au grand public. D'où la nécessité, pour exploiter au mieux la nano-électronique, de disposer de systèmes de très petite taille.



**Figure 12.6** Le mur quantique.

On peut observer des effets quantiques pour une boîte cubique de petite dimension. Effets quantiques : ceux qui sont différents des effets classiques connus aux plus grandes dimensions. Le fonctionnement est donc différent.

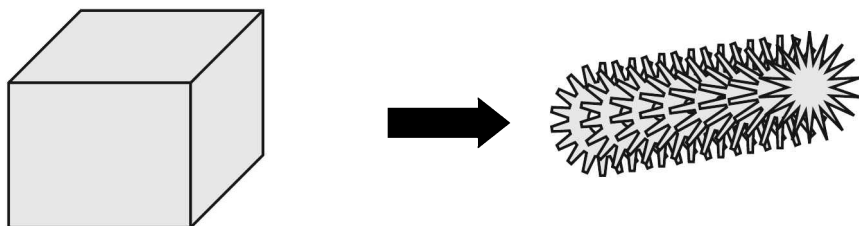
Un des intérêts des nanotechnologies est de pouvoir faire du « sur-mesure ». Pour absorber ou émettre de la lumière à une longueur d'onde donnée, on choisit un matériau en fonction de ses niveaux atomiques ou moléculaires. Pour changer de longueur d'onde, il faut changer de matériau. Au niveau nanométrique, on peut, avec le même matériau, faire du « sur-mesure ». Si l'on considère l'exemple des nanoboîtes cubiques, nous avons vu (équation 1.9 du chapitre 1) que l'espacement des niveaux d'énergie dépend de la taille de la boîte. En variant les dimensions de celle-ci, on fait varier l'écartement, donc la longueur d'onde d'absorption ou d'émission de ce système. C'est ce qui est illustré schématiquement dans la partie gauche de la figure 12.6.

## 12.5 TOP-DOWN OU BOTTOM-UP ?

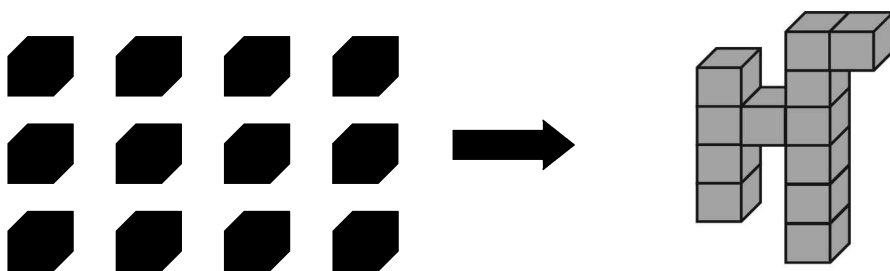
Il y a deux manières de créer des objets de taille nanométrique, comme cela est schématisé dans la figure 12.7. La première consiste à partir d'un objet macroscopique



que l'on « sculpte » de manière à façonner un objet de taille nanométrique ou sur lequel on dépose des matériaux avec un motif prédéterminé. La lithographie permet ainsi de créer des motifs à l'échelle micro ou nanométrique pour réaliser des microprocesseurs, des mémoires, etc. Cette approche est désignée sous le terme de « top-down » car elle va des grandes dimensions vers les petites.



La micro-électronique et la nano-électronique ont une approche top-down



L'électronique moléculaire a une approche bottom-up

**Figure 12.7** Approches top-down et bottom-up.

Dans l'approche top-down, on part du macroscopique pour aller au microscopique alors que, dans l'approche bottom-up, on construit la structure à partir d'éléments de taille nanométrique.

La lithographie optique permet de fabriquer les microprocesseurs ou les mémoires. Le principe est un peu analogue à la photographie. Une étape de lithographie consiste à exposer à la lumière une résine déposée à « la tournette » sur une plaquette de silicium (dans le cas de l'électronique silicium, qui est la technologie dominante) au travers d'un masque en utilisant une optique réductrice. Après développement, l'image du masque est reportée sur la résine. Selon que la résine est positive ou négative, on obtient l'image du masque ou de son complément. C'est analogue à la photographie où l'on peut avoir des négatifs ou des positifs (diapositives). Les parties insolées d'une résine positive sont dissoutes par le révélateur alors que ce sont les parties non exposées qui le sont dans le cas d'une résine négative. On peut ensuite graver sélectivement le substrat ou faire un dépôt sur les parties dissoutes par le révélateur, le reste du substrat étant protégé par la résine encore en place. Après cette opération, on dissout le reste de résine et on recommence l'opération pour un nouveau niveau

de masquage. Entre deux niveaux de masquage, l'alignement doit être très précis. Dans les microprocesseurs modernes, on peut avoir plus de 25 niveaux de masquage. Certains d'entre eux servent par exemple à interconnecter des composants fabriqués lors d'une opération précédente.

La précision du motif que l'on peut réaliser dépend de la longueur d'onde de la lumière utilisée pour illuminer la résine au travers du masque. Dans les années 1980, l'industrie micro-électronique utilisait des lampes à mercure donnant de l'UV proche, d'une longueur d'onde de 436 nm. Cela permettait de graver des structures dont la largeur de trait était de 3  $\mu\text{m}$ . Après avoir utilisé des sources à 365 nm, les lasers à excimères ont pris la relève au milieu des années 1990 en produisant de l'UV lointain : 248 nm pour le KrF (krypton-fluor) et 193 nm pour l'ArF (argon-fluor). Il est alors possible d'atteindre des résolutions de 90 à 110 nm (nœuds technologiques). On qualifie de nœud technologique la plus petite dimension que l'on peut réaliser. Ainsi, les nœuds technologiques (règles de dessin) diminuent constamment. Diverses astuces permettent maintenant d'avoir des largeurs de trait inférieures à la longueur d'onde. Les nœuds technologiques sont actuellement de 45 nm, 32 nm et 22 nm.

La lithographie X n'est pas simple à utiliser car on ne peut pas dévier les rayons X avec des lentilles comme on le fait pour des longueurs d'ondes plus grandes et il faut utiliser des miroirs.

La méthode de lithographie la plus précise est la lithographie électronique, dans laquelle on utilise un faisceau d'électrons que l'on pilote de manière à irradier la résine aux endroits désirés. C'est une méthode d'irradiation séquentielle (point par point comme le balayage d'un écran cathodique de télévision) contrairement à l'irradiation globale d'une résine que l'on utilise en lithographie optique ou UV, où tous les points de la résine non protégés par le masque sont irradiés en même temps. On peut atteindre des résolutions de quelques nanomètres. Son inconvénient est d'être très lente puisque l'on procède par balayage, d'où l'idée d'utiliser des matrices de canons à électrons individuellement pilotés pour augmenter la cadence. À cause de sa lenteur, la lithographie par électrons est réservée à la fabrication de masques, à la recherche, ou pour de petites séries.

L'autre approche consiste à créer des objets à partir d'atomes ou de molécules par auto-organisation. C'est l'approche « bottom-up ». C'est la voie suivie par l'électronique moléculaire. L'auto-organisation est souvent nécessaire car il y a un nombre énorme d'atomes ou de molécules à assembler. Auto-organiser la matière se fait relativement facilement quand il s'agit de fabriquer un film mince, par exemple. C'est beaucoup plus difficile pour des réalisations plus complexes, voire parfois impossible. Lors de l'auto-organisation d'une surface, un des problèmes qu'il faut résoudre est l'adressage d'un des points de cette surface. Sans cette possibilité, les usages du dispositif sont restreints. Heureusement, de nombreuses nouvelles techniques de construction d'objets nanométriques se développent dans lesquelles on amène, un

par un, des atomes ou molécules plus ou moins complexes à des endroits déterminés. C'est un processus lent aussi cherche-t-on à paralléliser les opérations, ce qui permet d'augmenter fortement les cadences.

La manière la plus simple de réaliser des couches nanométriques, voire monoatomiques ou monomoléculaires, est d'utiliser la technique de Langmuir-Blodgett, dans laquelle on transfère sur un substrat une monocouche déposée sur un liquide. Le problème est que toutes ces couches sont identiques et qu'il n'est pas possible d'adresser un atome ou une molécule particulière du film.

Il est aussi possible de réaliser des objets de taille nanométrique avec d'autres technologies comme la « dip-pen lithography », dans laquelle on utilise la pointe d'un microscope à force atomique comme une plume ayant comme « encre » des molécules synthétiques ou naturelles que l'on déposera à l'endroit désiré. C'est un processus lent que l'on peut accélérer avec une matrice de tels dispositifs. Ainsi, avec 55 000 « plumes », on peut écrire 88 millions de motifs en 5 minutes. Aujourd'hui, on peut utiliser des systèmes possédant plus d'un million de plumes et pouvant avoir des encres différentes.

Certains scientifiques pensent que l'on pourra, dans le futur, utiliser des nano ou microrobots intelligents pour assembler les briques élémentaires. Certaines personnes se sont inquiétées de ces perspectives en faisant remarquer que ces nanorobots pourraient un jour se retourner contre l'homme. Il faut toutefois tempérer ces inquiétudes. Ces dispositifs seront encore loin du vivant et ont besoin d'énergie pour fonctionner, de la même manière qu'un être vivant a besoin de nourriture pour vivre. Cette limitation réduit donc les risques évoqués. De plus, l'intelligence et les possibilités dont chaque humain est doté sont très liées à l'ensemble de la société dans laquelle il vit. Ceci est illustré par l'histoire qui s'est passée en 1920 en Inde où deux fillettes élevées par les loups ont été recueillies. La première, âgée d'environ 1 an et demi, est morte rapidement mais la seconde, âgée de 8 ans et demi, a vécu une quinzaine d'années. Elle a mis 6 ans pour apprendre à marcher comme un être humain et, à la fin de sa vie, son vocabulaire n'était que d'une cinquantaine de mots. Des expériences menées sur des singes d'une famille particulière de chimpanzés ont consisté à leur apprendre un langage de sourds-muets ou de signes. Le meilleur d'entre eux avait ainsi pu acquérir un vocabulaire d'un millier de mots et était capable de faire des phrases. Par conséquent, la culture et l'environnement de ses semblables sont importants pour l'homme, ce qui rend peu probable que des robots puissent en faire autant avant très longtemps.

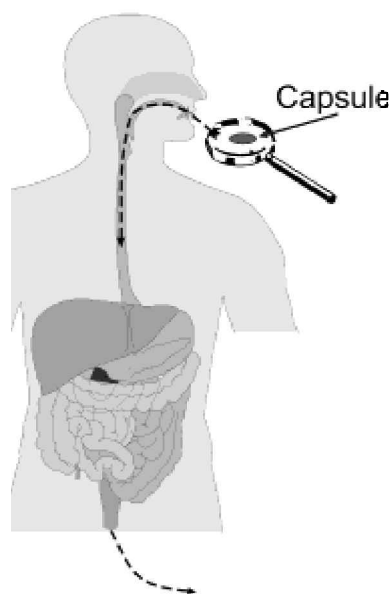
## 12.6 LA NANOMÉDECINE

Parmi les applications des nanotechnologies, la médecine et la santé sont un domaine où elles vont jouer un rôle de plus en plus important. On peut classer les applications selon trois objectifs importants qui sont : mieux voir, mieux soigner et mieux réparer.

### 12.6.1 Mieux voir

Mieux voir signifie être capable de faire de l'imagerie médicale non invasive (c'est-à-dire sans interaction physique avec le patient). C'est le cas des scanners ou des appareils de RMN. Passer un scanner est bien moins douloureux que subir une biopsie et comporte moins de risques. Atteindre des précisions importantes pour aboutir à un diagnostic plus précis, diminuer la dose d'exposition des patients lors de l'utilisation de dispositifs d'imagerie basés sur les rayonnements ionisants, réaliser des mesures en temps réels, etc. demande des puissances de calcul et de stockage de plus en plus grandes. Après les dispositifs actuels, basés sur la micro-électronique, la nano-électronique interviendra naturellement dans une petite partie des dispositifs.

Envoyer dans le corps humain des dispositifs d'imagerie sans que le patient soit incommodé est déjà une réalité avec des systèmes contenant une microcaméra que l'on avale et qui va explorer l'intestin. Un exemple de microsystème dédié à l'imagerie non invasive est schématisé dans la figure 12.8. Il s'agit d'une capsule endoscopique qui peut explorer le colon (coloscopie). La capsule, développée par une équipe israélienne, ne pèse que 4 g et contient une petite caméra vidéo associée à une électronique permettant de traiter les signaux et de les transmettre à un dispositif que le patient porte à la ceinture. Cette capsule contient aussi une source de lumière, des dispositifs d'optique et une source d'énergie. Le patient avale la capsule qui voyage dans son intestin, ce qui permet, en particulier, de vérifier l'intestin grêle en plus du colon. Demain ces dispositifs seront encore plus petits et plus performants. Ils pourront explorer les endroits les plus reculés du corps humain et y intervenir.



**Figure 12.8** Utilisation d'une microcapsule instrumentée pour explorer les intestins d'un patient.

Les biopuces sont des microsystèmes biologiques où des protéines ou des fragments d'ADN sont fixés sur un support de verre ou de silicium. Elles permettent par exemple de très rapidement identifier des gènes. La lecture des biopuces peut impliquer de l'électronique ou de l'optique. L'intérêt de ce mode de détection est la très faible quantité d'échantillon nécessaire, la rapidité et le coût très bas.

On peut également citer les laboratoires sur puce qui sont plus complexes et qui pourront inclure des objets de taille nanométrique, dont de la nano-électronique. Il s'agit de dispositifs miniaturisés à l'extrême capables de réaliser des analyses médicales ou d'autres mesures. Il y a plusieurs avantages à pouvoir travailler à petite échelle. La première est de n'avoir besoin que d'un très petit échantillon (nanogouttes). Les autres sont un accroissement de la vitesse de réaction (une réaction chimique ou biologique procède selon un mouvement brownien où la longueur de diffusion est inversement proportionnelle au carré de la taille du récipient), une diminution des coûts et la possibilité de réaliser de nombreuses analyses en parallèle en utilisant des matrices de laboratoires sur puces.

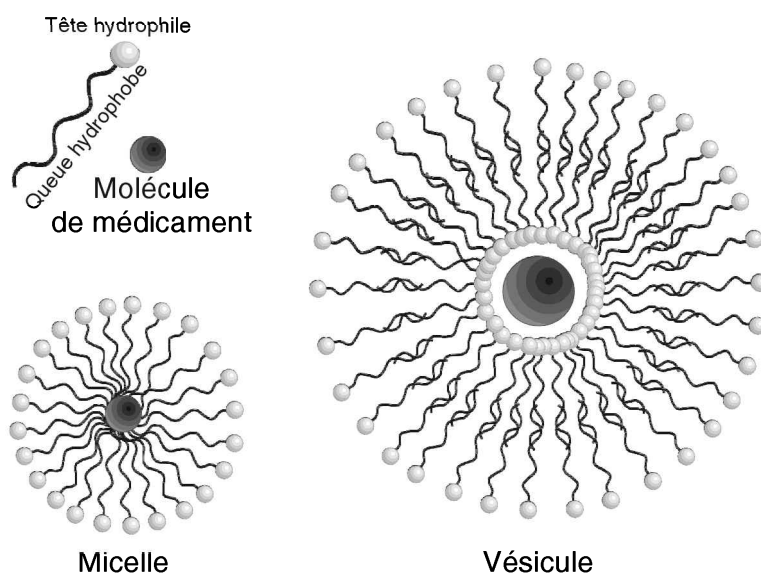
Enfin, on peut également avoir un mariage entre l'inerte et le vivant dans les puces à cellules. Il s'agit là de dispositifs couplant des cellules vivantes à de l'électronique. De tels dispositifs peuvent par exemple permettre d'étudier rapidement la toxicité d'un grand nombre de molécules chimiques fabriquées par chimie combinatoire et dont on veut éliminer les moins prometteuses. On peut ainsi faire le criblage de molécules pour sélectionner celles qui ont un potentiel comme médicament pour soigner une pathologie donnée. Des marqueurs nanométriques permettront aussi, dans le futur, de suivre de grosses molécules comme les protéines lors de leur cheminement dans l'organisme.

### 12.6.2 Mieux soigner

Pour mieux soigner, il faut pouvoir administrer le médicament à la bonne dose, au bon moment et au bon endroit. Dans l'administration classique d'un médicament, seule une partie de celui-ci est utile pour agir sur le symptôme, une autre partie étant perdue dans l'organisme avec parfois des conséquences négatives sur certaines parties de celui-ci. Il faut donc mieux cibler les médicaments. Quelques-uns sont maintenant encapsulés. On peut les diriger au bon endroit et ils peuvent alors agir sur des cibles spécifiques. Des capsules nanométriques pourraient contenir le principe actif et libérer celui-ci au bon moment ou/et au bon endroit. Dans les dispositifs les plus sophistiqués, on pourrait imaginer que la libération du médicament se fasse sur ordre extérieur. Pour cela, il faudrait une antenne dans la nanocapsule ainsi qu'un peu d'électronique, de taille nanométrique compte tenu des dimensions. En délivrant le médicament de manière très spécifique, on diminue les effets secondaires car parfois une partie du principe actif a réagi avec d'autres parties du corps avant d'avoir atteint sa cible. La faible taille de la nanocapsule lui permettrait également de franchir des barrières naturelles comme la barrière hémato-encéphalique qui empêche l'accès au cerveau. On arrive donc dans

le domaine du médicament « intelligent ». C'est dans le même ordre d'idée que l'on développe et développera des médicaments qui se comportent comme des missiles et foncent sur leurs cibles qui peuvent être par exemple des cellules cancéreuses.

Une manière d'encapsuler un médicament est par exemple d'utiliser des micelles ou des vésicules (figure 12.9). Celles-ci sont composées de molécules ayant une tête hydrophile (qui aime l'eau) et une queue hydrophobe (qui n'aime pas l'eau). Si la molécule de médicament est hydrophobe, par exemple, elle peut être entourée par ces molécules pour former une micelle comme l'indique la figure 12.9. Si elle est hydrophile, il peut se former une membrane sphérique double couche (comme on le voit pour la vésicule de la figure 12.9).



**Figure 12.9** Principe de l'encapsulation d'un médicament dans une micelle ou une vésicule.

### 12.6.3 Mieux réparer

La nano-électronique va aussi très certainement jouer un rôle important dans la réparation de l'être humain. L'homme vit de plus en plus longtemps et certains de ses organes nécessiteront d'être réparés ou remplacés. Certaines prothèses auront de meilleures propriétés si elles sont constituées ou recouvertes de nanomatériaux. Des organes défaillants pourront être remplacés. C'est notamment le cas du système de vision. Des premières tentatives ont été faites dans ce domaine. Il s'agit de coupler directement la rétine à un système électronique. Pour avoir une vision de bonne qualité, il faut un grand nombre de pixels et l'on devra travailler dans le domaine de la nano-électronique. En effet, il sera nécessaire de disposer de traitements de l'information très miniaturisés

pour pouvoir atteindre des puissances de traitement suffisantes. On atteint maintenant au niveau du laboratoire des rétines ayant plus de 1 000 pixels.

Les nanomatériaux seront aussi très utiles pour réparer ou consolider les dents. Des nanocomposites utilisés dans les amalgames existent déjà. On peut également penser à une régénération de tissus dentaires lésés. Des nanorobots pourront peut-être un jour être utilisés pour réparer les dents.

Nanotechnologies et médecine vont ainsi donner naissance à un nouveau domaine : la nanomédecine, qui permettra d'explorer, de comprendre et de soigner le vivant. Médicaments intelligents, organes artificiels, interfaces avec le cerveau, exploration atraumatique, etc. vont se développer de plus en plus grâce aux progrès de la micro et nano-électronique.

## 12.7 NANOPARTICULES ET SANTÉ

Les nanoparticules que l'on peut utiliser pour fabriquer des systèmes de taille nanométrique, micrométrique ou macroscopique sont si petites qu'elles peuvent franchir certaines barrières naturelles du corps humain. C'est d'ailleurs un de leurs intérêts lorsqu'on les utilise comme médicament. Dans certaines parties du corps humain, elles pourraient s'avérer toxiques. Il y a pour le moment trop peu de résultats pour tirer des conclusions définitives sur ce sujet et des études sont en cours. Les résultats de certaines d'entre elles sont parfois contradictoires et nécessitent des compléments.

Toutes les nanoparticules n'ont néanmoins pas la même toxicité. Plusieurs paramètres entrent en jeu comme leur forme, leur pureté, leur composition chimique, leur taille, etc. À ce titre, les nanotubes de carbone semblent plus toxiques que les autres particules, particulièrement lorsqu'ils sont impurs. Les formes sphériques semblent moins toxiques. Le danger des nanoparticules n'est pas tant pour le consommateur que pour les personnes qui sont en contact avec elles lors de leur fabrication, de l'élaboration de matériaux ou lors d'opérations spéciales telles que le sciage de ces derniers. Pour ce qui concerne plus particulièrement la nano-électronique, la fabrication se fait dans des salles blanches et les procédés sont parfaitement confinés pour éviter les poussières extérieures. Le risque est donc nul en fonctionnement normal de fabrication.

Les seuls retours d'expérience sur une longue période concernent les cosmétiques, en particulier les crèmes solaires. Depuis une vingtaine d'années des nanoparticules d'oxyde de titane ( $\text{TiO}_2$ ) ou de zinc, d'un diamètre de 15-20 nm, sont utilisées comme filtre anti-UV. Il semblerait qu'il n'y ait pas d'impact mesurable sur la santé à l'heure actuelle. Ces nanoparticules sont souvent enrobées de vitamines ou de silice pour éviter la formation de radicaux libres néfastes pour la peau. L'oxyde de titane sous forme de nanoparticules est d'ailleurs utilisé depuis longtemps dans les peintures.

## 12.8 NANO-ÉLECTRONIQUE ET LIBERTÉS INDIVIDUELLES

La micro-électronique permet d'obtenir des systèmes de traitement et de stockage de l'information de plus en plus petits et de plus en plus puissants. Chaque consommateur a maintenant la possibilité d'avoir sur lui sa musique, ses films, ses livres, etc. Il peut aussi être connecté au reste du monde à tout moment et en tout lieu. La nano-électronique, en augmentant la puissance et les possibilités des systèmes de traitement de l'information, va en décupler les possibilités.

Si le consommateur peut obtenir de l'information sur beaucoup de choses, la contrepartie est que l'extérieur peut aussi obtenir de l'information sur le consommateur. Chaque technologie a ses avantages et ses inconvénients et il convient de bien peser ceux-ci. Si une carte bancaire est un moyen de paiement très pratique, la surveillance de son utilisation permet de savoir ce que l'on achète, où et quand. La surveillance de la population et le détournement des renseignements stockés dans des bases de données peuvent connaître des excès qui n'ont pas échappé au législateur. La France a mis en place la loi « informatique et libertés » pour prévenir ces excès.

Les étiquettes RFID (Radio Frequency Identification) permettent de suivre les objets, ce qui est intéressant en termes de traçabilité, de gestion des stocks, etc. De telles étiquettes électroniques de la taille d'un grain de riz sont déjà implantées sur des animaux. On pourrait le faire sur l'homme avec toutes les applications positives ou négatives que l'on peut imaginer. Avec des systèmes électroniques très petits, on peut aussi créer de la poussière intelligente dont chacun des grains est un microsystème permettant de surveiller certains paramètres de l'environnement. Au niveau médical, les biopuces ou les laboratoires sur puce peuvent détecter la possibilité pour un patient d'avoir certaines maladies. Utilisé à bon escient, cela permet de faire de la prévention. Mal utilisé, cela peut conduire à de la discrimination à l'embauche ou à l'assurance, par exemple.

Chaque technologie peut avoir un impact positif ou négatif sur l'être humain. Les systèmes de traitement de l'information n'échappent pas à la règle. La miniaturisation de plus en plus grande des dispositifs, l'augmentation de puissance de traitement et la diminution des coûts les font entrer de plus en plus dans notre vie quotidienne. Des barrières doivent être mises en place pour protéger le citoyen afin que ce qui est un avantage ne se transforme pas en inconvénient. L'évolution vers une utilisation massive des systèmes de traitement de l'information et de stockage de celle-ci est toutefois irréversible. Si on peut ralentir le progrès, on ne peut pas l'arrêter, surtout dans une situation où tout se joue à l'échelle mondiale. Parallèlement à la technologie, il est donc nécessaire de réfléchir à la manière dont celle-ci s'insère dans la société afin d'en tirer le maximum d'avantages et d'en minimiser les inconvénients.



## EXERCICES

### Exercice 12.1

Dans un microscope à effet tunnel, tout se passe comme s'il y avait une barrière de potentiel entre la pointe et la surface à explorer. Nous allons supposer qu'elle peut se représenter sous forme d'un potentiel carré tel que :

$V(x) = 0$  pour  $x \leq 0$  (région I) et  $x \geq a$  (région III) et  $V(x) = V_0$  pour  $0 \leq x \leq a$  (région II).

On considère un électron d'énergie cinétique  $E < V_0$ .

1. Calculer la fonction d'onde de l'électron dans les différentes régions.
2. Calculer la densité de courant de probabilité dans la région III en supposant que l'onde incidente est stationnaire.
3. Calculer le coefficient de transmission  $T$  à travers la barrière.
4. Pour les cas correspondant à la microscopie par effet tunnel, on a  $a \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} \gg 1$ , calculer l'expression approchée de  $T$ . Evaluer la variation de transmission sur une distance de 0,1 nm si  $V_0 = 5$  eV,  $E = 1$  eV et  $a = 1$ .

## CORRIGÉS

### Exercice 12.1

1. L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

On pose  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$  et  $\gamma = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$

Si l'électron arrive de  $x < 0$ , on a  $\psi_I(x) = e^{ikx} + A e^{-ikx}$  ;  
 $\psi_{II}(x) = B_1 e^{i\gamma x} + B_2 e^{-i\gamma x}$  et  $\psi_{III}(x) = C e^{ikx}$ .

Les coefficients sont déterminés en écrivant les conditions aux limites (continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée aux interfaces). On obtient 4 équations à 4 inconnues. on en déduit que :

$$C = - \frac{4i k e^{-ika}}{\gamma \left[ e^{\gamma a} \left( 1 - \frac{ik}{\gamma} \right)^2 - e^{-\gamma a} \left( 1 + \frac{ik}{\gamma} \right)^2 \right]}$$

2. La densité de courant de probabilité  $J(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \left( \psi(x) \frac{\partial \psi^*(x)}{\partial x} - \psi^*(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right)$ .

Dans la région I le flux incident vaut :  $\psi(x, t) = e^{ikx} e^{-iEt/\hbar}$  d'où  $J_T(x, t) = \frac{\hbar k}{m}$  comme on pouvait s'en douter. Le flux transmis dans la région III vaut  $\frac{\hbar k |C|^2}{m}$ .

3. Le coefficient de transmission  $T$  vaut  $T = \frac{J_T(x)}{J(x)} = |C|^2$ . Soit :

$$T = \frac{4k^2 \gamma^2}{(k^2 + \gamma^2) \sinh^2 \gamma a + 4k^2 \gamma^2}$$

4. Si  $\gamma a \gg 1$  on a  $T \simeq \frac{4k^2 \gamma^2}{(k^2 + \gamma^2)(e^{\gamma a}/2)^2}$ . En prenant comme ordre de grandeur  $V_0 = 5$  eV,  $E = 1$  eV et  $a = 1$  nm, on peut montrer que le coefficient de transmission est divisé d'un facteur à peu près 10 sur une distance de 0,1 nm. On peut donc localiser les atomes avec une bonne précision.



# Bibliographie

Quelques références utiles pour compléter le présent ouvrage.

## Ouvrages en langue française

M. BROUSSEAU, *Physique du solide, propriétés électroniques*, Masson (1992)

J.P. COLINGE et F.VAN DE WIELE, *Physique des dispositifs semi-conducteurs*, De Boeck-Wesmael éditeur (1996)

P.N. FAVENNEC, *Technologies pour les composants à semi-conducteurs*, Masson (1997)

C. KITTEL, *Physique de l'état solide*, Dunod (1969)

F. LÉVY, *Physique et technologie des semi-conducteurs*, Presses Polytechniques et Universitaires Romandes (1995)

H. MATHIEU, *Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques*, Masson (1987, 1990, 1996)

Ch. NGÔ et Hélène NGÔ, *Physique quantique*, Dunod (1995)

Ch. NGÔ et Hélène NGÔ, *Physique statistique*, Dunod (1995)

B. SAPOVAL et C. HERMANN, *Physique des semi-conducteurs*, Ellipses (1998)

A. VAPAILLE et R. CASTAGNÉ, *Dispositifs et circuits intégrés semi-conducteurs*, Dunod (1990)

## Ouvrages en langue anglaise

N.W. ASHCROFT et N.D. MERMIN, *Solid state physics*, Saunders college (1976)

J.S. BLAKEMORE, *Solid state physics*, Cambridge University Press (1969,1974)

P. BHATTACHARYA, *Semiconductor optoelectronic devices*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ (1994)

K.F. BRENNAN, *The physics of semiconductors*, Cambridge University Press (1999)

R. DALVEN, *Introduction to applied solid state physics*, Plenum Press (1990)

- R. ENDERLEIN et N.J. HORING, *Fundamental of semiconductor physics*, World Scientific (1997)
- M. JAROS, *Physics and applications of semiconductor microstructures*, Clarendon Press Oxford (1989)
- R.E. HUMMEL, *Electronic properties of materials*, Springer Verlag (1993)
- G. PARKER, *Introductory semiconductor device physics*, Institute of Physics Publishing (2004)
- B. TANNER, *Introduction to the physics of electrons in solid*, Cambridge University press (1995)
- R. TURTON, *The quantum dot*, W.H.Freeman Spektrum (1995)
- J. SINGH, *Semiconductor devices, an introduction*, Mc Graw-Hill, N.Y. (1993)
- M. SCHUR, *Physics of semiconductor devices*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ (1990)
- S.M. SZE, *Physics of semiconductor devices*, John Wiley and Sons (1981)
- P.Y. YU et M. CARDONA, *Fundamentals of semiconductors*, Springer-Verlag (1996)

# Index

## A

absorption radiative 177  
accepteur 98  
action 10  
affinité électronique 149  
approximation  
    adiabatique 60  
    de Bohr Oppenheimer 60  
    de champ moyen 61  
    de particules indépendantes 61  
arséniure de gallium 48  
arséniure de gallium 42  
atome d'hydrogène 62  
auto-cohérente (méthode) 71  
autodopage 113  
avalanche (effet) 125

## B

bande  
    d'énergie 59  
    de conduction 64, 96  
    de valence 64, 96  
Bloch (théorème) 67  
boîte  
    cubique 63  
    quantique 195  
Boltzmann  
    approximation 106  
    facteur 25  
Born-von Kármán (condition) 71  
Bose (température) 28  
Bose-Einstein 9, 28  
bosons 9  
bottom-up 221  
Bragg  
    pics 51  
    plans 53  
Bragg (diffraction) 51  
Brillouin (schéma) 72, 73  
Brillouin (zone) 53, 66, 73

## C

$C_{60}$  217  
canal 164  
capacité calorifique 89  
centres de recombinaison 98  
chaleur spécifique 88  
champ moyen 61  
claquage 125  
collecteur 157  
compact (empilement) 47  
Compton (effet) 2  
conductivité  
    électrique 119  
    thermique 89  
Coulomb (blocage) 201  
courant  
    d'obscurité 142  
    de drain 165  
    de fuite 142  
    de génération 143  
    de recombinaison 143  
    inverse 142  
cristal idéal 39  
cubique faces centrées 47

## D

de Broglie 3  
défaut(s) 54  
dégénérescence (degré) 13  
densité  
    d'états 104, 106  
    de niveaux 196  
diamant 80  
diffraction 49–51  
diffusion 119, 127  
diode 144, 149, 161, 186  
dip-pen lithography 224  
dislocation 54, 55  
dispositifs à un électron 204  
dissipation 126

distribution  
 de Gibbs 25  
 de Maxwell-Boltzmann 28  
 donneur 98  
 dopage 108  
 dopants amphotères 113  
 drain 162, 164  
 dualité onde–corpuscule 2

## E

effet tunnel 14, 219  
 Einstein  
 relation 126, 128  
 électron(s)  
 de cœur 60  
 de valence 60  
 densité 105  
 quasi libres (modèle) 73  
 électronique moléculaire 208  
 émetteur 157  
 émission  
 radiative 185  
 spontanée 177  
 stimulée 177, 187  
 énergie  
 de Fermi 31  
 point zéro 7  
 ensemble 18, 24  
 canonique 24  
 grand canonique 26  
 microcanonique 24  
 entropie statistique 18  
 épitaxie 173  
 équation  
 centrale 74  
 de Newton 84  
 de Schrödinger 5, 6  
 équilibre  
 condition 21  
 thermique 22  
 ergodique (hypothèse) 18  
 espace de phase 19  
 état  
 de diffusion 13  
 de surface 144  
 lié 10, 13  
 non lié 10  
 stationnaire 6  
 Ewald (construction) 51

excitation  
 extrinsèque 180  
 intrinsèque 180  
 exciton 89

## F

Fermi  
 énergie 23  
 mouvement 32  
 niveau extrinsèque 114  
 surface 75  
 Fermi-Dirac (statistique) 9, 27  
 fermions 9  
 FET 164  
 Fick (loi) 127  
 fil quantique 195  
 fluctuations 21, 126  
 fonction d'onde 3  
 fonction de partition 26  
 canonique 25  
 Fourier (loi) 90  
 fullerènes 218

## G

gap 64, 96, 178  
 graphène 218  
 grille 162, 164

## H

Hall (effet) 129, 204  
 Heisenberg (relation d'incertitude) 7  
 hétérojonction 172  
 hexagonal compact 47  
 Hilbert (espace) 4  
 homojonction 172  
 hybridation 70  
 hydrogène 12

## I

III–V 48  
 impuretés 179  
 accepteurs 112  
 donneurs 110  
 incertitude (principe) 7  
 indices de Miller 45  
 interaction électron–phonon 61  
 interstice tétraédrique 48  
 irréversibilité 19  
 isolants 76, 80

**J**

JFET 164  
 joint de grains 54, 55  
 jonction *pn* 137, 141  
 jonction métal–métal 147  
 jonction ohmique 151

**L**

lacune 54  
 Landau (niveau) 205  
 Langmuir-Blodgett 224  
 largeur naturelle 8  
 laser 187  
     à excimères 223  
 Laue (diffraction) 50  
 LED 186  
 lithographie 222  
 loi  
     d'action de masse 108  
     d'Ohm 122  
     de Moore 214  
 luminescence 185

**M**

magnétorésistance 207  
 maille 40  
 masse effective 98, 101, 102  
 MESFET 166  
 mésoscopique 194  
 métaux 76, 79  
 méthode  
     des liaisons faibles 67  
     des liaisons fortes 62  
     du pseudo-potentiel 70  
 micro-état 17  
 microscope à effet tunnel 216  
 Miller (indices) 45  
 mobilité 122  
 modèle  
     à particules indépendantes 61  
     Kronig–Penney 68  
 mode normal 84  
 moment cristallin 87, 99  
 multipuits quantique 199  
 mur quantique 193

**N**

nano-électronique 212  
 nanocapsule 226  
 nanomédecine 225  
 nanoparticules 211  
 nanotubes de carbone 218  
 Newton (équation) 84  
 niveau de Fermi 31  
 niveaux profonds 113  
 nombre quantique 8, 13

**O**

offset 173  
 onde 2, 86  
 opérateur 3  
 optique (branche) 87  
 optiques (mesures) 179  
 orbitale 63

**P**

particules indépendantes 61  
 Pauli (principe d'exclusion) 9  
 Peltier (effet) 148  
 phonon 83, 87  
 photoconduction 181, 182  
 photodiode 183  
 photoélectrique (effet) 2  
 photons 177, 181, 185  
 photovoltaïque 183, 184  
 physique  
     quantique 1  
     statistique 17  
 Planck (constante) 3  
 porteur(s)  
     libre 119  
     majoritaires 114, 142  
     minoritaires 114, 142  
 postulats  
     de la physique quantique 4  
     de la physique statistique 17  
 potentiel chimique 23  
 principe de superposition 5  
 problème à  $N$  corps 61  
 puits quantique 195, 197



**Q**

quantique  
   confinement 193  
   efficacité 183  
   nombre 8  
 quasiparticule 99

**R**

relation d'Einstein 126  
 réseau 39  
   bidimensionnel 41  
   cristallin 40  
   cubique 41  
   de Bravais 39  
   réciproque 43  
   triclinique 41  
   tridimensionnel 41  
   vibrations 83  
 réticulaire (plan) 45  
 réversible (transformation) 20  
 RFID 229

**S**

Schottky (diode) 149  
 Sebeck (effet) 148  
 semi-conducteur 76, 80, 108  
   compensé 109  
   de type  $n$  109  
   de type  $p$  110  
   dopé 108  
   extrinsèque 108  
   intrinsèque 107  
   multivallées 104  
   univallée 103  
 silicium 42, 48  
 source 162, 164  
 spectre  
   continu 11  
   discret 10  
 spin 8, 9  
 spintronique 206  
 statistique  
   Bose-Einstein 9  
   Fermi-Dirac 9  
 STM 216  
 superréseau 199

surface 144  
 symétries 40, 65

**T**

température 22  
 temps de relaxation 121  
 théorème  
   d'équipartition 27  
   de Bloch 67  
   de fluctuation dissipation 126  
 thermodynamique  
   deuxième principe 20  
   troisième principe 33  
 top-down 221  
 transistor  
   bipolaire 157  
   MOS 168  
 transistor (effet) 157  
 transition 97, 178–180  
 travail d'extraction 145  
 trou 95, 105

**U**

unipolaire (dispositif) 162

**V**

valeur moyenne 21  
 valeur propre 3, 5  
 variable  
   extensive 23  
   intensive 23  
 vitesse  
   de dérive 122  
   de groupe 120

**W**

wafers 213  
 Wigner-Seitz (maille) 40

**Z**

Zener (effet) 126  
 zone  
   d'inversion 168  
   de déplétion 140  
   désertée 140