

Chapitre II:

Les semi-conducteurs en équilibre

I. Densité d'états pour les électrons dans un intervalle d'énergie compris entre l'énergie E et E+dE

La densité d'états présente le nombre de « places » disponibles (occupées ou non) par les électrons (dans la BC) et les trous (dans la BV).

Cas d'électrons:

$N(E)dE$ = nombre d'états (cm^{-3}) dans la « tranche » d'énergie $[E, E+dE]$ (unité: $\text{cm}^{-3} \cdot \text{eV}^{-1}$)

Soit:

$$n_c(E) = g(k) d^3k$$

Avec $g(k)$ est, par définition, la densité d'états électronique dans l'espace réciproque (« espace des k »). Dans un espace à 3D, elle est égale à $\frac{2}{(2\pi)^3}$

Approximation des bandes paraboliques: les surfaces à $E=\text{cte}$, sont des sphères dans L'espace des k ,

La masse effective est isotrope

$$n_c(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_c)^{1/2}$$

Cas de trous:

De même la densité d'états dans la BV:

$$n_v(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_h^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E_v - E)^{1/2}$$

II. Probabilité d'occupation d'un état d'énergie E

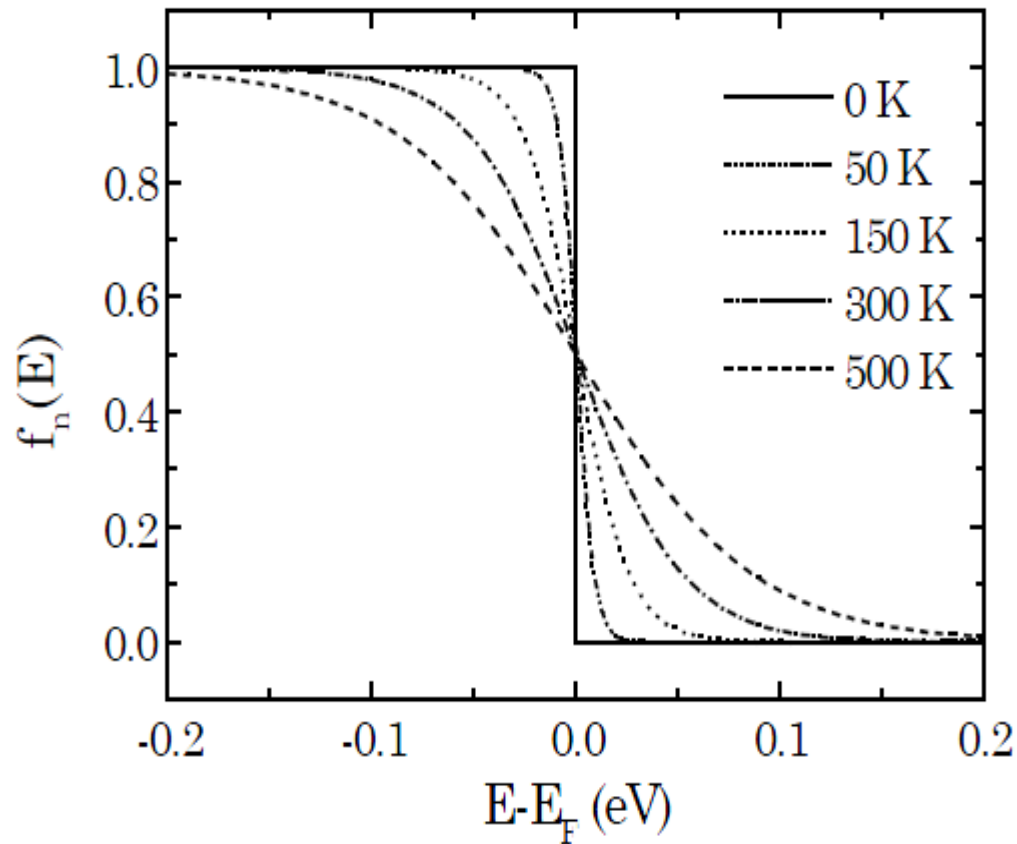
1. Probabilité d'occupation d'un état d'énergie E par un électron

Les électrons sont des particules à spin demi-entier. Ils obéissent à la statistique de Fermi-Dirac. La probabilité d'occupation d'un niveau d'énergie E par un électron est donnée par

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

$$f_n(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)}$$

La figure ci-dessous donne l'évolution de $f_n(E)$ en fonction de la différence $E-E_F$ et de la température. On peut constater que sa valeur varie plus ou moins rapidement de 1 à 0 en passant toujours par $\frac{1}{2}$ pour $E = E_F$.



2. Probabilité d'occupation d'un état d'énergie E par un trou

Il va de soit que la probabilité d'occupation d'un niveau d'énergie E par un trou est $1-f_n(E)$ car l'absence d'un électron implique la présence d'un trou et vice versa.

$$f_p(E) = 1 - f_n(E)$$

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

$$f_p(E) = 1 - f_n(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_F - E}{kT}\right)}$$

Dans le cas où la différence $E - E_F$ est supérieure à quelques kT , l'expression de $f_n(E)$ se simplifie, car le terme en exponentiel est très supérieur à 1, d'où:

$$f_n(E) \approx \frac{1}{\exp(\frac{E - E_F}{kT})} = \exp(-\frac{E - E_F}{kT})$$

Ce qui correspond à la statistique de Boltzmann.

Dans le cas où $(E_F - E)$ est supérieur à quelques kT on a:

$$f_p(E) \approx \frac{1}{\exp(\frac{E_F - E}{kT})} = \exp(-\frac{E_F - E}{kT})$$

III. Densité des porteurs à l'équilibre

Cas des électrons:

Nombre d'électrons dans une tranche d'énergie dE :

$$dn = n_c(E) f_n(E, T) dE$$

La **densité d'électrons libre à l'équilibre** n_0 [cm⁻³] est alors obtenue en sommant pour tous les niveaux d'énergie de la BC, le produit de la densité d'états $n_c(E)$ ou nombre de places disponibles par la probabilité d'occupation de ces places $f_n(E)$:

$$n_0 = \int_{Bc} n(E).dE = \int_{Ec}^{+\infty} n_c(E).f_n(E).dE$$

En considérant que le niveau de Fermi reste dans la bande interdite en respectant les inégalités ($E_c - E_F \gg kT$), on utilise l'approximation Boltzmann, d'où:

$$n_0 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right)$$

Où N_c (cm^{-3}) est la densité équivalente d'états dans la bande de conduction ramenée à E_c et vaut:

$$N_c = 2 \left(\frac{2\pi \cdot m_e^* \cdot kT}{h^2} \right)^{3/2}$$

Cas des trous:

On procède de même pour déterminer la densité des trous:

$$p_0 = \int_{B_v} p(E).dE = \int_{-\infty}^{E_v} n_v(E).f_p(E).dE$$

En considérant que le niveau de Fermi reste dans la bande interdite en respectant les inégalités ($E_F - E_v \gg kT$), on utilise l'approximation Boltzmann, d'où:

$$p_0 = N_v \exp\left(\frac{E_v - E_F}{kT}\right)$$

Où $N_v(E)$ est la densité équivalente d'états dans la bande de valence ramenée à E_v .

$$N_v = 2 \left(\frac{2\pi \cdot m_h^* \cdot kT}{h^2} \right)^{3/2}$$

Cas d'un semi conducteur intrinsèque

$$n_0 = p_0 = n_i = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_{Fi}}{kT}\right)$$

Calcul du produit $n_0 \cdot p_0$ à l'équilibre

En multipliant la densité d'électrons par la densité de trous, on obtient un résultat indépendant de la position du niveau de Fermi (et donc du dopage). Cette loi s'appelle "loi d'action de masse"

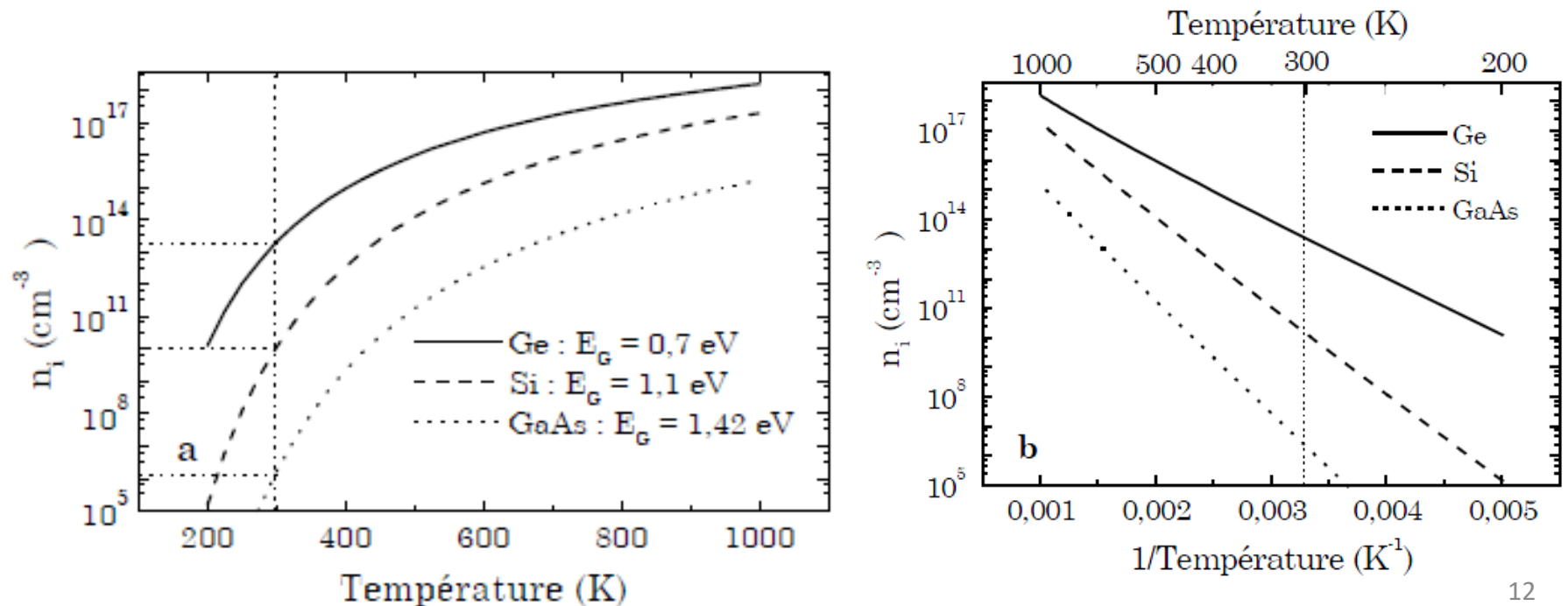
$$n_0 \cdot p_0 = N_v \cdot N_c \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right)$$

Dans un matériau intrinsèque, les concentrations en porteurs libres p_0 et p_0 sont égales à la concentration intrinsèque n_i , ce qui permet d'écrire:

$$n_i = \sqrt{N_v \cdot N_c} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right) \propto T^{3/2} \cdot \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right)$$

L'équation $n_i(T)$ illustrée à la figure ci-dessous pour le silicium, le germanium et l'arséniure de gallium, traduit le fait que plus la température est élevée, plus il faut disposer de l'énergie pour libérer les électrons de l'état lié (état de valence) vers l'état libre (de conduction) ce qui revient à franchir la bande de conduction. Un matériau à grand gap a une meilleure stabilité thermique.

On remarque sur la figure qu'on peut assimiler les courbes $\ln(n_i)$ en fonction de $1/T$ comme des droites de pente $-E_g/2k$, ce qui permet de déterminer expérimentalement le gap E_g .



Loi d'action de masse:

Quelque soit le dopage, l'expression suivante est toujours vérifiée

$$n_0 \cdot p_0 = N_v \cdot N_c \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right) = n \cdot p = n_i^2$$

IV. Calcul du niveau de Fermi

1, Cas d'un semi conducteur intrinsèque

On exprime aussi le niveau de Fermi intrinsèque en fonction de N_c et N_v en égalisant $n_i = n_0$ ou $n_i = p_0$

$$n_i = \sqrt{N_v \cdot N_c} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right) = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_{Fi}}{kT}\right)$$

On aura

$$E_{Fi} = \frac{E_c + E_v}{2} - \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{N_c}{N_v}\right) = E_i - \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{N_c}{N_v}\right) \approx E_i$$

Où E_i est le milieu de la bande interdite

Cas général:

On exprime la densité n_0 en fonction de n_i en écrivant

$$E_c - E_F = (E_c - E_{Fi}) + (E_{Fi} - E_F)$$

L'équation $n_0 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right)$ devient :

$$n_0 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_{Fi}}{kT}\right) \exp\left(-\frac{E_{Fi} - E_F}{kT}\right) = n_i(T) \exp\left(-\frac{E_{Fi} - E_F}{kT}\right)$$

Cette équation confirme que si $n_0 > n_i$, alors $E_F > E_{Fi}$.

De même, l'expression de p_0 en fonction de n_i est :

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

2, Cas d'un semi-conducteur dopé N

Equation de neutralité électrique:

Dans un semi-conducteur homogène en équilibre, la somme des charges positives est égale à la somme des charges négatives,

$$p_0 + N_D^+ = n_0 + N_A^-$$

Où N_D^+ et N_A^- représentent les densités des impuretés ionisées.

Semi-conducteur type N: $N_A^- = 0$ $p_0 + N_D^+ = n_0$

Pour trouver les densités N_D^+ , il faut multiplier le nombre de places N_D par la probabilité d'occupation du niveau d'énergie E_D par un trou ($f_p(E_D)$).

$$N_D^+ = N_D f_p(E_D) = N_D \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_F - E_D}{kT}\right)}$$

Pour les atomes accepteurs, ionisés négativement, il faut utiliser la probabilité d'occupation du niveau E_A par un électron ($f_n(E_A)$) multipliée par le nombre d'états disponibles (N_A)

$$N_A^- = N_A f_n(E_A) = N_A \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_A - E_F}{kT}\right)}$$

A température ambiante, tous les impuretés sont ionisées: $N_D^+ = N_D$

D'où l'équation de neutralité devient: $n_0 = p_0 + N_D$

La loi d'action de masse $\rightarrow n_0 = \frac{n_i^2}{p_0} + N_D$

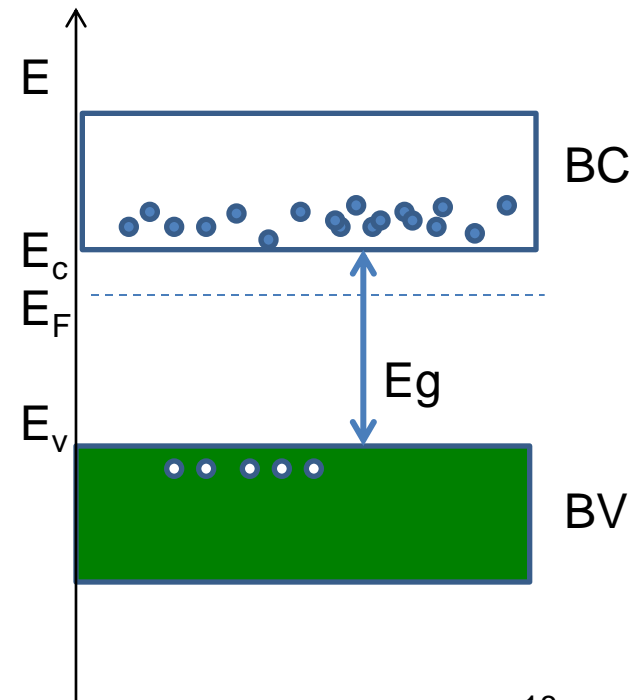
De cette équation, on peut exprimer la concentration en porteurs libres en fonction de $n_i(T)$ et du dopage. Comme pour ce type de semi-conducteur on a $n_0 \gg p_0$, alors l'équation se résume à:

$$n_0 \approx N_D$$

D'où l'expression du niveau de Fermi à la température ambiante :

$$E_F = E_C - kT \ln\left(\frac{N_c}{N_D}\right) = E_{Fi} + kT \ln\left(\frac{N_D}{n_i}\right)$$

Ainsi plus la densité de donneurs est élevée, plus le niveau de Fermi se rapproche de la bande de conduction. A la limite si $N_D = N_c$ le niveau de Fermi entre dans la bande de conduction, on dit alors que le semi-conducteur est dégénéré



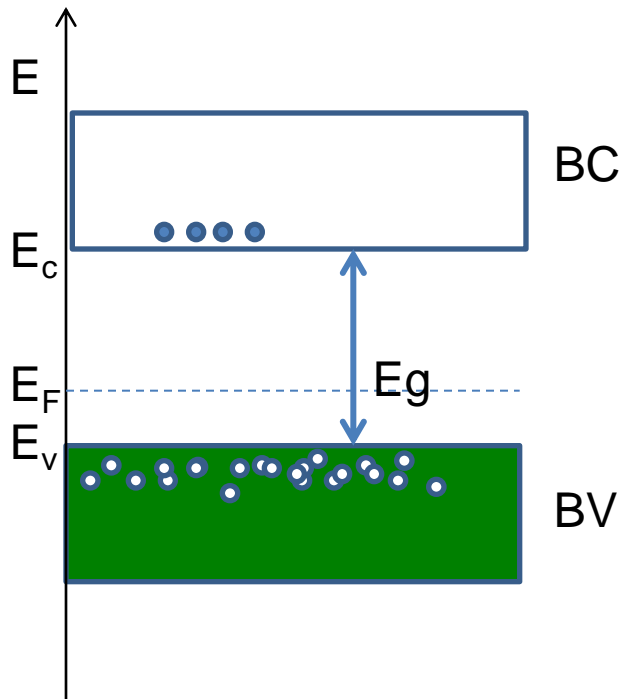
3, Cas d'un semi-conducteur dopé P

$$p_0 + N_D^+ = n_0 + N_A^-$$

Pour un semi-conducteur type P, à température ambiante, on a:

$$p_0 \approx N_A$$

$$E_F = E_V + kT \ln\left(\frac{N_v}{N_A}\right) = E_{Fi} - kT \ln\left(\frac{N_A}{n_i}\right)$$



Ainsi plus la densité d'accepteurs est élevée plus le niveau de Fermi se rapproche de la bande de valence.

A la limite si $N_A = N_v$ le niveau de Fermi entre dans la bande de valence, on dit alors que le semi-conducteur est dégénéré.

V. Niveau de Fermi en fonction de la température

Pour un semi-conducteur de type N, on revient à l'équation de neutralité

$$p_0 + N_D^+ = n_0 + N_A^-$$

On écrit $n_0 = N_D^+$ et on résout l'équation en E_F

$$N_D^+ = N_D \frac{1}{1 + \exp(\frac{E_F - E_D}{kT})} = N_c \exp(-\frac{E_C - E_F}{kT})$$

De même pour les trous dans un semi-conducteur de type P, on écrit $p_0 = N_A^-$ et on résout l'équation en E_F :

$$N_A^- = N_A \frac{1}{1 + \exp(\frac{E_A - E_F}{kT})} = N_v \exp(\frac{E_V - E_F}{kT})$$

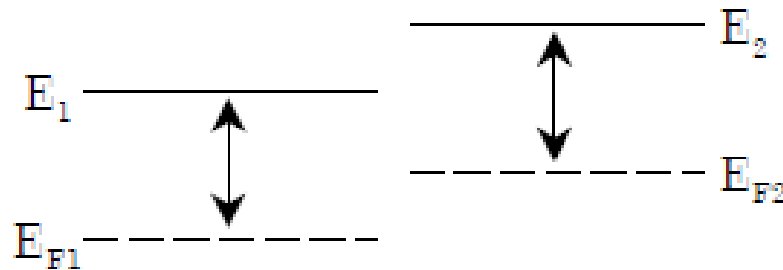
VI. Niveau de Fermi dans une structure à l'équilibre

Propriété fondamentale

A l'équilibre thermodynamique, quelle que soit la structure du matériau (homogène ou non), le niveau de Fermi est constant à travers la structure.

En effet, imaginons deux régions de la structure (région 1 et région 2, vérifiant l'égalité $E_1 - E_{F1} = E_2 - E_{F2}$ (Figure ci-dessous), cela signifie que la concentration des électrons est la même sur les niveaux E_1 et E_2 . Si les niveaux de Fermi sont tel que $E_{F1} < E_{F2}$, ce qui implique un mouvement des électrons de la région 2 vers la région 1, ce qui traduit un flux d'électrons et donc un état de non équilibre thermodynamique.

Conclusion: A l'équilibre on doit avoir $E_{F1} = E_{F2} = E_F = \text{constante}$



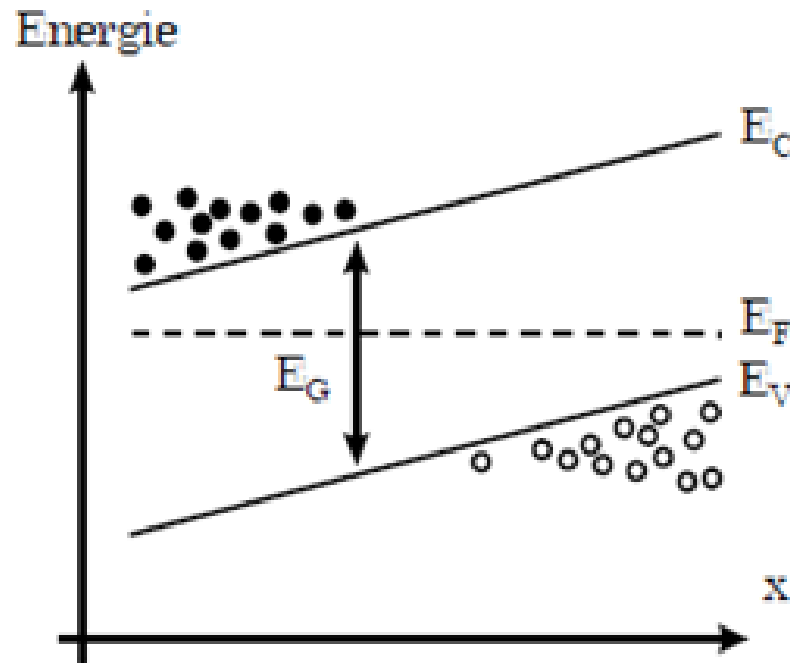
Structure formée de deux régions
Vérifiant $E_1 - E_{F1} = E_2 - E_{F2}$

La figure ci-dessous donne un exemple de diagramme de bandes d'un matériau à l'équilibre thermodynamique (le niveau de fermi est constant et ne varie pas en fonction de x . le gap E_g reste constant (même matériau) mais le dopage n'est pas uniforme. La plus forte concentration d'électrons à gauche et celle des trous à droite vient de la statistique de Fermi-Dirac ($F_n(E)$ et $f_p(E)$).

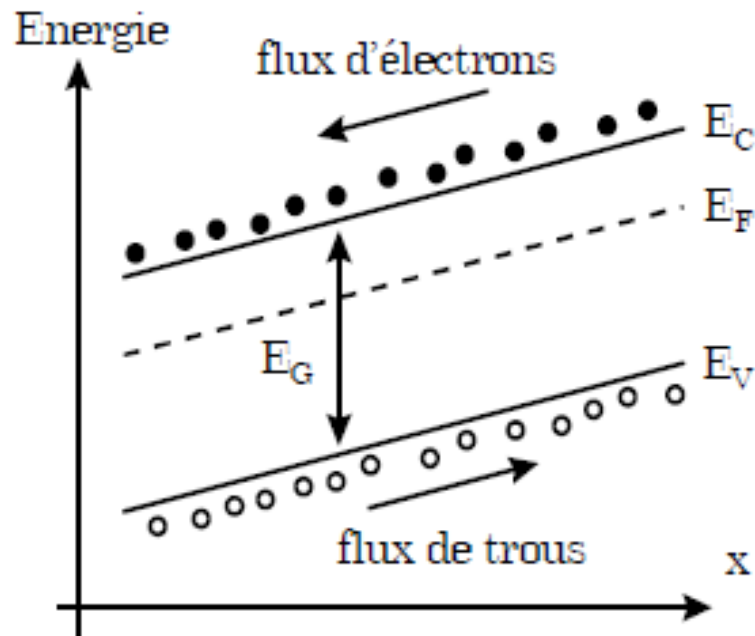
Dans la partie gauche le semi-conducteur est de type N (E_F est plus proche de E_c).

Dans la partie droite il est de type P.

La variation linéaire de $E_c - E_F$ correspond à un dopage qui varie exponentiellement.



Semi-conducteur à l'équilibre thermodynamique (à dopage non uniforme)



Semi-conducteur hors d'équilibre thermodynamique

La variation de E_F en fonction de x indique que le semi-conducteur n'est pas à l'équilibre thermodynamique, ce qui induit un flux d'électrons et de trous.

Cette situation correspond à un échantillon de semi-conducteur soumis à une différence de potentiel extérieure U_{app} appliquée entre ses deux extrémités.

