

## Chapitre n°7. Semi-conducteurs

Nous allons ici nous intéresser aux matériaux semi-conducteurs, grâce auxquels la microélectronique est née et s'est développée. Dans ce chapitre, nous allons tenter de répondre à deux questions clés :

1. **Comment s'effectue la conduction électrique dans un semi-conducteur intrinsèque ?** Un semi-conducteur intrinsèque est un semi-conducteur pur, i.e. exempt d'impuretés susceptibles de modifier la concentration en porteurs libres : on est capable en microélectronique de fabriquer du silicium à moins de 1 ppb d'impuretés (1 ppb = une partie par milliard, soit un rapport de  $10^{-9}$ ). Nous verrons d'abord que la conduction dans un semi-conducteur est liée à deux types de porteurs de charge libres (les électrons et les trous). Puis nous montrerons comment calculer les concentrations en porteurs libres dans un tel semi-conducteur. Enfin nous définirons sa conductivité électrique.
2. **Comment et pourquoi doper un semi-conducteur pur ?** Pour réaliser des composants à semi-conducteurs, il est nécessaire de disposer de matériaux dont la conduction se fasse soit majoritairement par les électrons, soit majoritairement par les trous. En outre, il est important de disposer de semi-conducteurs aux caractéristiques aussi peu dépendantes de la température que possible. Pour ces raisons, on introduit dans le réseau cristallin d'un semi-conducteur intrinsèque des impuretés dites de dopage. *Se reporter aux vidéos en ligne (site Moodle de l'UE).*

### 1. Conduction électrique dans un semi-conducteur intrinsèque

#### 1.1 Modèle des bandes d'un semi-conducteur

Un schéma simplifié des bandes dans un semi-conducteur est présenté sur la figure 7.1. La bande de valence (dont la limite supérieure est notée  $W_V$ ) est séparée de la bande de conduction (dont la limite inférieure est notée  $W_C$ ) par une bande interdite ou *gap* de largeur :

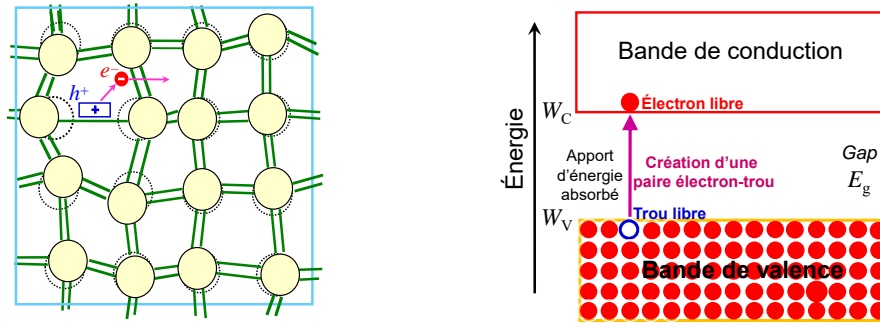
$$E_g = W_C - W_V. \quad (7.1)$$

À 0 K, la bande de valence contient tous les électrons de valence et la bande de conduction est vide : le cristal est isolant. Au fur et à mesure que la température  $T$  augmente, on apporte de l'énergie thermique au cristal ( $E_{th} = 3k_B T$ , où  $k_B$  est la constante de Boltzmann). Du fait de la température, les atomes du réseau cristallin se mettent à vibrer les uns par rapport aux autres. Par exemple, la température de  $T = 300$  K correspond à une énergie de  $E_{th} \approx 78$  meV. Une liaison peut alors se briser et libérer son électron de valence, qui devient libre et donc disponible pour la conduction électrique du cristal. Cet électron laisse derrière lui un vide (liaison pendante), appelé **trou** et assimilé à une **quasi-particule** (masse  $m_h$ , charge  $+e$ ). Il y a création d'une **paire électron-trou**.

De la même façon, un apport d'énergie suffisant au cristal tel que l'éclairement du cristal avec des photons d'énergie  $E_{ph}$  permet de créer des paires électron-trou. On en déduit qu'il y a **autant d'électrons libres que de trous libres pour un semi-conducteur intrinsèque**.

**Du point de vue du modèle des bandes**, les électrons libres en concentration volumique  $n$  sont dans la bande conduction et les trous libres en concentration volumique  $p$  sont dans la bande de valence. À 300 K, le semi-conducteur intrinsèque possède toujours des électrons libres dans la bande de conduction et donc des trous libres dans la bande de valence. L'éclairement du cristal avec des photons d'énergie

$E_{ph} = h\nu$  (où  $h$  est la constante de Planck et  $\nu$  la fréquence) crée des paires électron-trou uniquement si  $h\nu \geq E_g$ . Le *gap* d'un semi-conducteur est compris typiquement entre 0,5 et 3 eV ( $E_g \gg 3$  eV pour les isolants).



**Figure 7.1.** À gauche : Réseau cristallin soumis à des vibrations thermiques. Une liaison covalente se brise et libère son électron qui devient libre, donc disponible pour la conduction électrique du cristal. Cet électron laisse derrière lui un trou, assimilé à une particule fictive. Il y a création d'une paire électron-trou.

À droite : Du point de vue modèle des bandes, les électrons dits libres sont dans la bande de conduction et les trous dits libres sont dans la bande de valence. C'est parce qu'il y a de tels porteurs libres que le cristal semi-conducteur conduit (un peu) l'électricité à température ambiante. Plus la largeur  $E_g$  du *gap* est grande, plus la création de paires électron-trou est difficile et plus le cristal est isolant.

## 1.2 Calcul des concentrations en porteurs libres

Comment calculer la concentration en porteurs libres dans une bande, à savoir la concentration  $n$  en électrons libres dans la bande de conduction ou la concentration  $p$  en trous libres dans la bande de valence ?

### 1.2.1 Densités d'états d'énergie

Il s'agit d'abord de dénombrer le nombre d'états d'énergie disponibles pour les porteurs libres dans chacune des bandes. On définit ainsi :

- la densité d'états  $g_{BC}(W)$  dans la bande de conduction, qui correspond au nombre d'états quantiques dans la bande de conduction par unité d'énergie et par unité de volume :

$$g_{BC}(W) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \left( \frac{4\pi^2 m_e^*}{h^2} \right)^{3/2} \sqrt{W - W_C} \quad (7.2)$$

- la densité d'états  $g_{BV}(W)$  dans la bande de valence, qui correspond au nombre d'états quantiques dans la bande de valence par unité d'énergie et par unité de volume :

$$g_{BV}(W) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \left( \frac{4\pi^2 m_h^*}{h^2} \right)^{3/2} \sqrt{W_V - W} \quad (7.3)$$

où  $m_e^*$  et  $m_h^*$  sont les masses effectives des électrons et des trous, respectivement.

### 1.2.2 Fonction de Fermi-Dirac

Il s'agit ensuite de répartir les porteurs libres sur ces états d'énergie selon une loi de probabilité.

- Pour les électrons, il s'agit de la statistique de Fermi-Dirac. La fonction de Fermi-Dirac  $f_{FD}(W)$  est la probabilité d'occupation (à l'équilibre) d'un niveau d'énergie  $W$  par un électron (libre ou non) :

$$f_{FD}(W) = \frac{\text{Nombre d'états occupés par les électrons entre } W \text{ et } dW}{\text{Nombre d'états disponibles entre } W \text{ et } dW} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{W - W_F}{k_B T}\right)} \quad (7.4)$$

où  $W_F$  est le niveau de Fermi, qui correspond à une probabilité d'occupation égale à  $1/2$ , quelle que soit la température.

La figure 7.2 montre l'évolution de la fonction de Fermi-Dirac en fonction de la différence d'énergie ( $W - W_F$ ) pour différentes valeurs de température.

- Pour les trous, on utilise la fonction complémentaire  $[1 - f_{FD}(W)]$  qui est la probabilité d'occupation (à l'équilibre) d'un niveau d'énergie  $W$  par un trou :

$$1 - f_{FD}(W) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{W_F - W}{k_B T}\right)}. \quad (7.5)$$

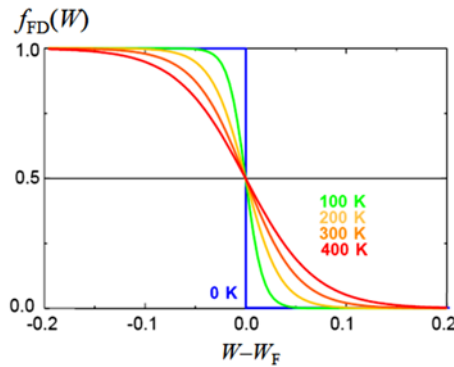
La relation (7.4) se simplifie dans les cas suivants (**approximation de Boltzmann**) :

- Si  $(W - W_F) \geq 3k_B T$ , alors  $\exp\left(\frac{W - W_F}{k_B T}\right) \gg 1$ , d'où :

$$f_{FD}(W) \approx \exp\left(-\frac{W - W_F}{k_B T}\right) \quad (7.6)$$

- Si  $(W - W_F) \leq 3k_B T$ , alors  $\exp\left(\frac{W - W_F}{k_B T}\right) \ll 1$ , d'où :

$$f_{FD}(W) \approx 1 - \exp\left(\frac{W - W_F}{k_B T}\right) \quad (7.7)$$



**Figure 7.2.** Fonction de Fermi-Dirac pour différentes températures, décrivant la probabilité de trouver un électron (qu'il soit libre ou pas) sur un niveau d'énergie.

La fonction vaut  $\frac{1}{2}$  pour  $W = W_F$  pour toute température.

Pour des énergies inférieures à  $W_F$ , on a une plus forte chance de trouver des électrons (il s'agit des électrons de valence situés dans la bande de valence, qui sont très nombreux) ;

Pour des énergies supérieures à  $W_F$ , on a moins de chance de trouver des électrons (il s'agit des électrons libres dans la bande de conduction qui sont beaucoup moins nombreux).

### 1.2.3 Concentration $n$ en électrons libres (à l'équilibre)

La concentration  $n$  en électrons libres dans la bande de conduction est obtenue en sommant, pour tous les niveaux d'énergie de la bande de conduction, le produit de la densité d'états  $g_{BC}(W)$  (nombre d'états disponibles dans la bande de conduction) par la probabilité d'occupation de ces états  $f_{FD}(W)$ , soit :

$$n = \int_{W_C}^{+\infty} g_{BC}(W) f_{FD}(W) dW. \quad (7.8)$$

En se plaçant dans le cadre de l'approximation de Boltzmann (7.6), le calcul de (7.8) conduit à :

$$\left\{ \begin{array}{l} n = N_C \exp\left(-\frac{W_C - W_F}{k_B T}\right), \\ \text{où } N_C = 2 \left(\frac{2\pi m_e^* k_B T}{h^2}\right)^{3/2} : \text{densité d'états effective dans la bande de conduction.} \end{array} \right. \quad (7.9)$$

La densité d'états effective  $N_C$  ainsi que la concentration  $n$  s'exprime en  $m^{-3}$  (USI). L'unité usuelle est  $cm^{-3}$ .

### 1.2.4 Concentration $p$ en trous libres (à l'équilibre)

La concentration  $p$  en trous libres dans la bande de valence est obtenue en sommant, pour tous les niveaux d'énergie de la bande de valence, le produit de la densité d'états  $g_{BV}(W)$  (nombre d'états disponibles dans la bande de valence) par la probabilité d'occupation de ces états  $[1 - f_{FD}(W)]$ , soit :

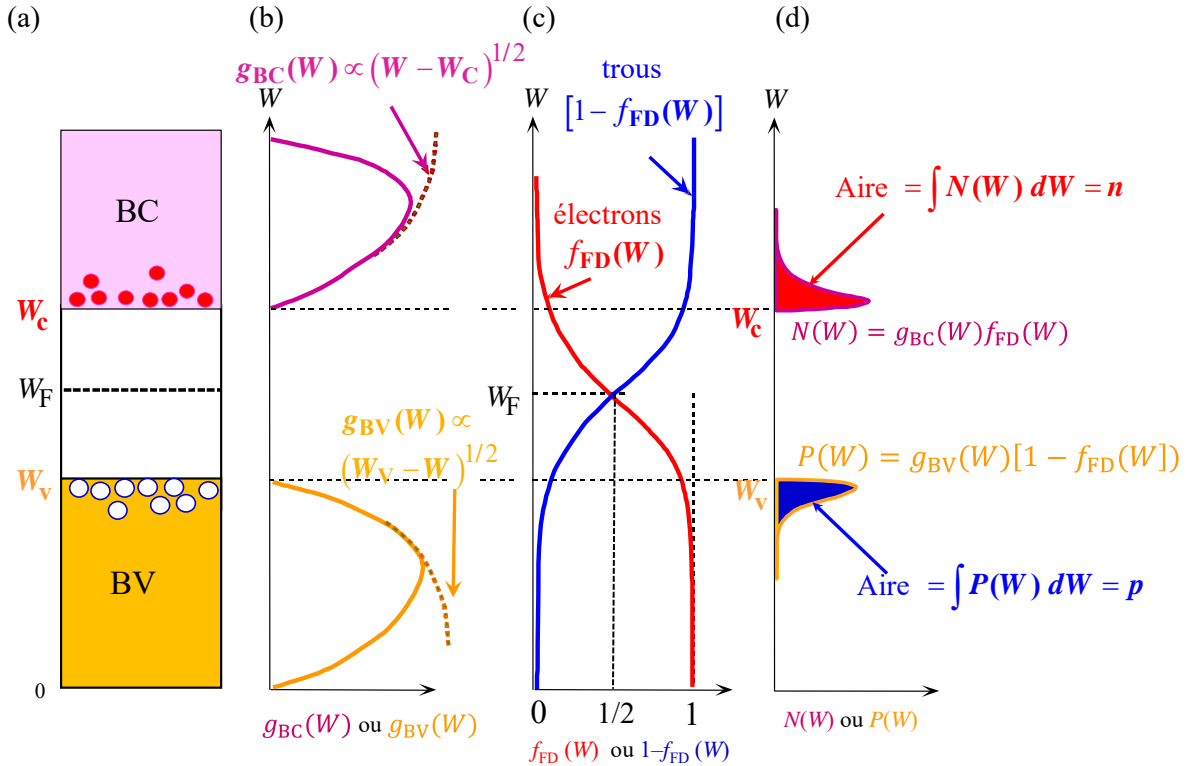
$$p = \int_{-\infty}^{W_V} g_{BV}(W) [1 - f_{FD}(W)] dW. \quad (7.10)$$

En se plaçant dans le cadre de l'approximation de Boltzmann (7.7), le calcul de (7.10) conduit à :

$$\left\{ \begin{array}{l} p = N_V \exp\left(-\frac{W_F - W_V}{k_B T}\right), \\ \text{où } N_V = 2 \left(\frac{2\pi m_h^* k_B T}{h^2}\right)^{3/2} : \text{densité d'états effective dans la bande de valence.} \end{array} \right. \quad (7.11)$$

La densité d'états effective  $N_V$  ainsi que la concentration  $p$  s'exprime en  $\text{m}^{-3}$  (USI). L'unité usuelle est  $\text{cm}^{-3}$ .

La figure 7.3 dévoile en particulier la répartition qualitative des électrons libres dans la bande de conduction et des trous libres dans la bande de valence.



**Figure 7.3.** Comment calculer les concentrations en porteurs de charge libres ?

(a) Schéma des bandes.

(b) Diagramme des densités d'états.

(c) Diagramme des fonctions de distribution des porteurs de charge.

(d) Diagramme des densités énergétiques

✓ des électrons libres dans la bande de conduction :  $N(W) = g_{BC}(W)f_{FD}(W)$  et

✓ des trous libres dans la bande de valence :  $P(W) = g_{BV}(W)[1 - f_{FD}(W)]$ .

Les concentrations  $n$  et  $p$  correspondent aux aires sous les courbes de  $N(W)$  et  $P(W)$ , respectivement.

### 1.2.5 Concentration intrinsèque $n_i$ (à l'équilibre) – Loi d'action de masse

Dans un semi-conducteur intrinsèque, il y a autant d'électrons libres que de trous libres ( $n = p$ ). On définit alors la concentration intrinsèque  $n_i$  comme :

$$n_i = n = p. \quad (7.12)$$

$n_i$  est exprimée  $\text{m}^{-3}$  (USI). L'unité usuelle est  $\text{cm}^{-3}$ .

En multipliant  $n$  (7.9) par  $p$  (7.11), on obtient un résultat indépendant du niveau de Fermi  $W_F$ . Il s'agit de la loi d'action de masse :

$$\text{Loi d'action de masse : } np = n_i^2 \Rightarrow n_i^2 = N_C N_V \exp\left(-\frac{W_C - W_V}{k_B T}\right) = N_C N_V \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right) \quad (7.13)$$

Ainsi, en utilisant les expressions de  $N_C$  (7.9) et  $N_V$  (7.11), on déduit que :

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right) = AT^{3/2} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right) \quad (7.14)$$

où  $A$  est une constante spécifique du matériau, dépendant en particulier des masses effectives des électrons et des trous, cf. (7.10) et (7.12).

La concentration intrinsèque dépend fortement de la température, comme le montre la figure 7.4.

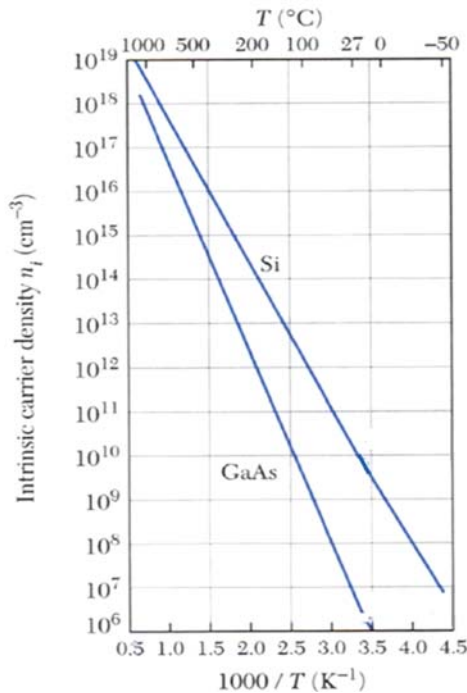
### 1.2.6 Niveau de Fermi intrinsèque $W_{Fi}$ (à l'équilibre)

Pour un semi-conducteur intrinsèque, le niveau de Fermi est appelé **niveau de Fermi intrinsèque**, noté  $W_{Fi}$ . On l'exprime en égalisant  $n_i$  et  $n$  ou  $n_i$  et  $p$  :

$$n_i = n \Rightarrow \sqrt{N_C N_V} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right) = N_C \exp\left(-\frac{W_C - W_F}{k_B T}\right) \Rightarrow \quad (7.15)$$

$$W_{Fi} = \frac{W_C + W_V}{2} - \frac{k_B T}{2} \ln\left(\frac{N_C}{N_V}\right) \approx \frac{W_C + W_V}{2}. \quad (7.16)$$

Le niveau de Fermi intrinsèque dépend faiblement de la température. On négligera cette dépendance dans le cadre de ce cours ; aussi le représentera-t-on situé au milieu du *gap*.



**Figure 7.4.** Évolution de la concentration volumique intrinsèque de Si et de GaAs en fonction de la température.

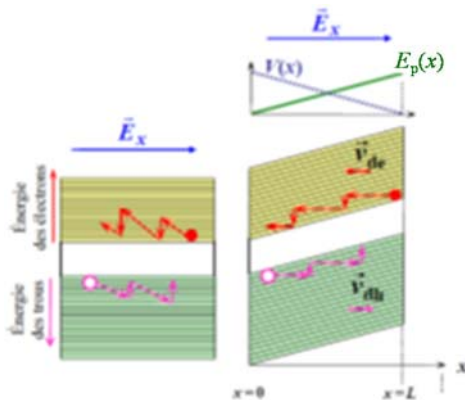
© S.M. Sze, 2<sup>ème</sup> édition, John Wiley & Sons, 2002

### 1.3 Conductivité électrique

Il y a deux types de porteurs de charge libres dans un semi-conducteur : l'électron porteur d'une charge  $(-e)$  situé dans la bande de conduction et le trou porteur d'une charge  $(+e)$  situé dans la bande de valence. En présence d'un champ électrique extérieur  $\vec{E}$  (appliqué entre les deux faces latérales d'un barreau semi-conducteur, Figure 7.5), les électrons libres dans la bande de conduction et les trous libres dans la bande de valence vont dériver dans leur bande respective :

- les électrons (de charge négative) vont dériver dans la bande de conduction avec une vitesse de dérive  $\vec{v}_{de}$  et dans le sens opposé au champ électrique (vers la face chargée positivement *i.e.*,  $x = 0$ ) et
- les trous (de charge positive) vont dériver dans la bande de valence avec une vitesse de dérive  $\vec{v}_{dh}$  et dans le sens du champ électrique (vers la face chargée négativement *i.e.*,  $x = L$ ).

Il y a apparition d'un courant d'électrons libres dans la bande de conduction et d'un courant de trous libres dans la bande de valence. De plus, on note une inclinaison ou encore **courbure des bandes** d'énergie suite à l'application du champ électrique.



**Figure 7.5.** Application d'un champ électrique à un cristal semi-conducteur intrinsèque. Le champ électrique  $\vec{E}$  met en mouvement les électrons libres (dans le sens opposé à  $\vec{E}$ ) et les trous libres dans le même sens que  $\vec{E}$ . Il y a donc un courant d'électrons libres et un courant de trous libres dans le cristal.

La **densité de courant électrique**  $\vec{J}$  du cristal semi-conducteur intrinsèque sous **champ électrique**  $\vec{E}$  va donc résulter de la **contribution des deux types de porteurs** de charge libres : les électrons libres dans la bande de conduction et les trous libres dans la bande de valence.

$$\vec{J} = (-e)n\vec{v}_{de} + e p \vec{v}_{dh} = e n_i (-\vec{v}_{de} + \vec{v}_{dh}) = e n_i (\mu_e + \mu_h) \vec{E}, \quad (7.17)$$

où  $\mu_e$  est la **mobilité des électrons libres** dans la bande de conduction et  $\mu_h$  est la **mobilité des trous libres** dans la bande de valence. (7.17) peut encore s'écrire en introduisant la **conductivité électrique**  $\sigma$  (en  $S \cdot m^{-1}$ ) du cristal sous la forme :

$$\vec{J} = \sigma \vec{E}, \text{ avec } \sigma = e n_i (\mu_e + \mu_h) > 0. \quad (7.18)$$