

Chapitre 3

Densité d'états dans les bandes de valence et de conduction

Distribution statistique et occupation des bandes

II.2.1 Semiconducteur non dégénéré

II.2.2 Semiconducteur intrinsèque

II.2.3 Semiconducteur fortement dopé (dégénéré)

II.2.4 Semiconducteur dopé (ou extrinsèque)

II.2.4.A Occupation des niveaux donneurs et accepteurs

II.2.4.B Détermination des concentrations de porteurs

Plan du cours

1/3
bases

1. Introduction

- Caractéristiques physiques des semiconducteurs
- Quels Matériaux pour quel type d'applications

2. Propriétés électroniques des semiconducteurs

- Structure de bandes
- Statistiques d'occupation des bandes
- Propriétés de transport
- Processus de recombinaison

3. Jonctions et interfaces

- Jonctions métal/semi-conducteurs
- Jonction p-n à l'équilibre, Jonction p-n hors-équilibre

1/3
transport

4. Composants électroniques

- Transistors bipolaires
- Transistors à effet de champ
- Dispositifs quantiques
- Nouveaux matériaux

1/3
optique

5. Composants optoélectroniques

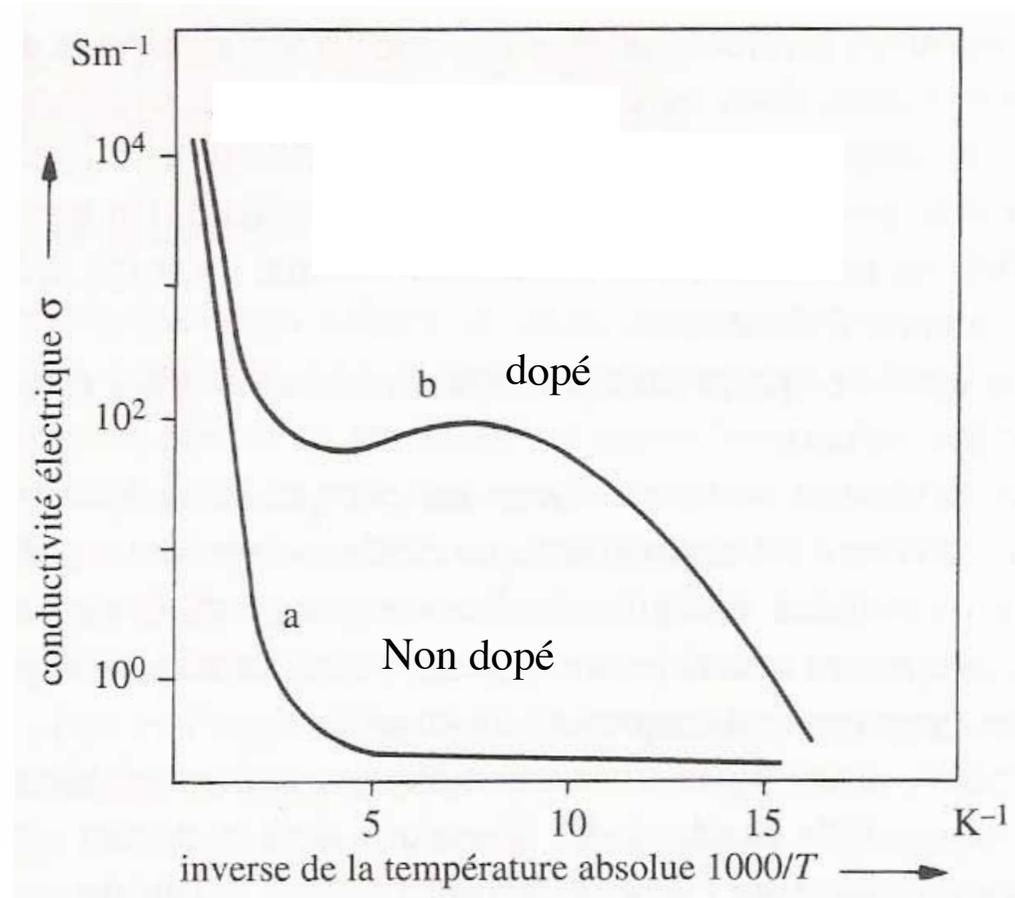
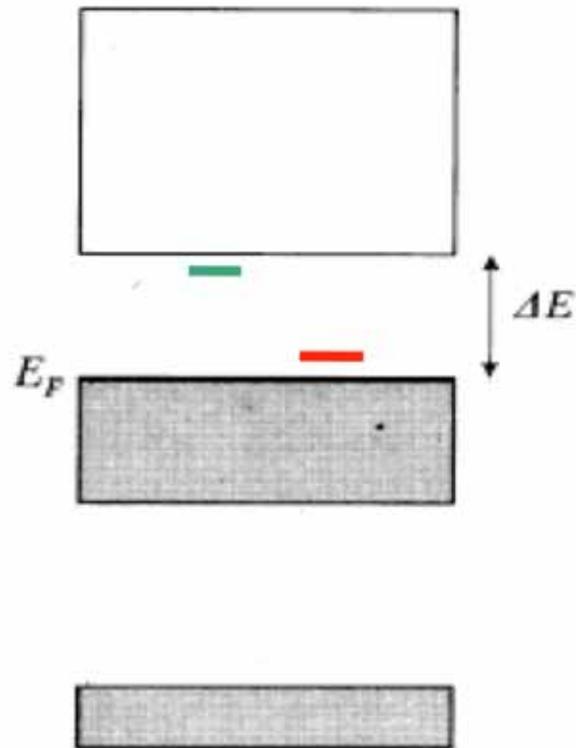
- Détecteurs
- Diodes électroluminescentes
- Diodes lasers
- Lasers à émission par la surface
- Lasers à cascade quantique

Statistiques d'occupation

But: Décrire les propriétés physiques d'un semiconducteurs telles que

- l'absorption
- la conductivité

Conductivité



La conductivité dépend aussi de la population de porteurs

Statistique d'occupation

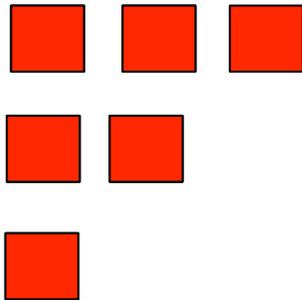
Densité d'états dans les bandes de valence et de conduction

Densité d'états \Rightarrow le nombre d'états disponibles pour les électrons



C'est une fonction qui ne dépend que de l'énergie

la température est responsable de la distribution des électrons sur ces états



Rem:

- 2 électrons de spin opposé par niveau
- à $T=0K$, densité nulle dans la BC

Statistique d'occupation

1D: soit une chaîne de N atomes \Rightarrow k peut prendre N valeurs comprises entre $-\pi/a$ et $+\pi/a$, avec une séparation de $2\pi/Na$

$$e^{ikNa} = 1 \Rightarrow k = \frac{2n\pi}{Na}$$

3D: chaque valeur de k occupe un volume de l'espace réciproque $V_r = (2\pi/Na)^3$, soit $8\pi^3/V_{\text{cristal}}$, avec $V_{\text{cristal}} = N^3a^3$ le volume du cristal dans l'espace réel

Densité d'états des électrons dans l'espace $k = 1 / V_r = V_{\text{cristal}}/8\pi^3$

Densité d'états des électrons dans l'espace k par unité de volume de cristal:

$$(1 / V_r) / \text{Volume du cristal } (V_{\text{cristal}}) = 1/8\pi^3$$

La densité d'états est uniforme \Rightarrow constante pour tout intervalle de k

En revanche, la densité d'états par intervalle d'énergie augmente avec l'énergie de par la relation de dispersion quadratique

Statistique d'occupation

Calcul de la densité d'états en fonction de l'énergie

$$E = E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

Attention: relation valable uniquement au voisinage d'un minimum de bande d'énergie quand m^* peut être définie

$$\Rightarrow k = \sqrt{2m^* (E - E_0) / \hbar^2}$$

Calculons le nombre d'états dans une sphère de rayon k :

$N = \text{volume de la sphère} \times \text{densité d'état volumique} \times 2$ (spins $+1/2$ et $-1/2$)

$$= \frac{4}{3} \pi k^3 \times \frac{1}{8\pi^3} \times 2$$

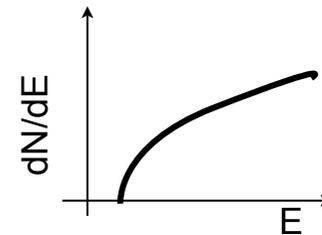
$$= \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} (E - E_0) \right)^{3/2}$$

Statistique d'occupation

Densité d'états par unité d'énergie $\Rightarrow dN/dE$

$$N_{3D}(E) = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} (E - E_0) \right)^{3/2}$$

$$\rho_{3D}(E) = \frac{dN_{3D}(E)}{dE} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{(E - E_0)}$$

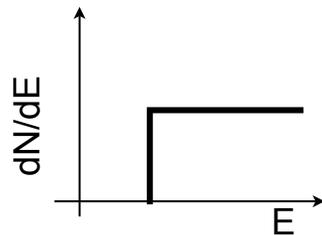


■ Densité d'états varie comme la racine carrée de l'énergie

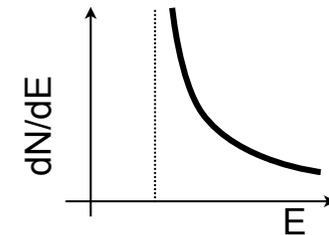
■ Densité d'états varie comme la masse effective à la puissance 3/2

Exercice: montrer que à 2 et 1 dimension:

$$\rho_{2D}(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \Pi(E - E_0)$$



$$\rho_{1D}(E) = \frac{\sqrt{2}}{\pi\hbar} \frac{1}{\sqrt{(E - E_0)}}$$



Occupation des bandes

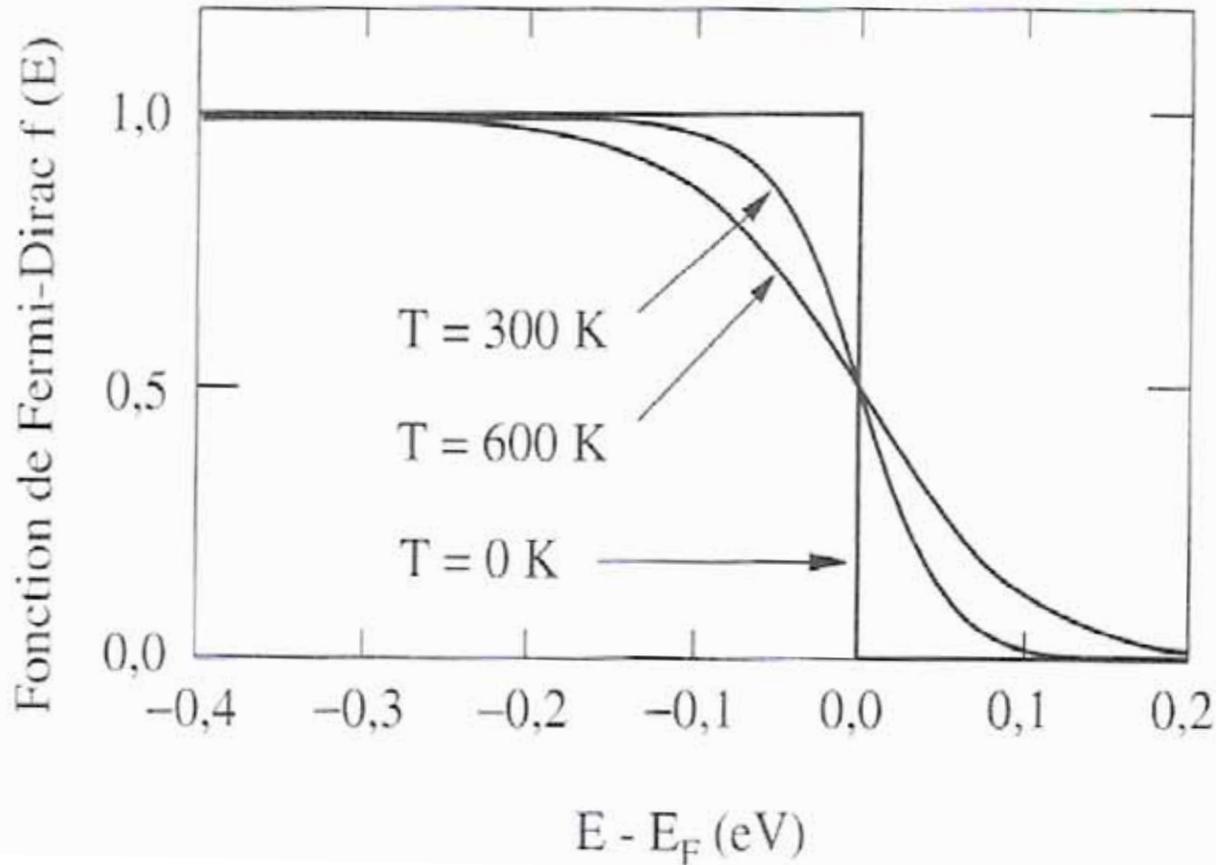
Electrons et trous suivent la statistique de Fermi-Dirac

La probabilité pour qu'un état d'énergie E soit occupé par un électron à une température T est donnée par la fonction de Fermi-Dirac :

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E - E_F)/k_B T}}$$

- C'est par définition le potentiel chimique des particules dans la structure
- Notons encore que le niveau de Fermi correspond à l'énergie pour laquelle la probabilité d'occupation pour un état, et ce quelle que soit la température, est égale à 1/2

Occupation des bandes



A 300 K, $E - E_F = 0.05 \text{ eV} \Rightarrow f(E) = 0.12$

$E - E_F = 7.5 \text{ eV} \Rightarrow f(E) = 10^{-129}$

<http://jas.eng.buffalo.edu/education/semicon/fermi/functionAndStates/functionAndStates.html>

Occupation des bandes

La densité d'électrons est le produit de la densité d'états $D(E)$ par la probabilité d'occupation de cet état $f(E)$

$$n_c(E) = f_c(E)D(E)$$

La densité de trous s'écrit de façon similaire en considérant la probabilité $f_v(E)$ d'avoir un état vide dans la bande de valence (c'est à dire un électron émis vers la bande de conduction)

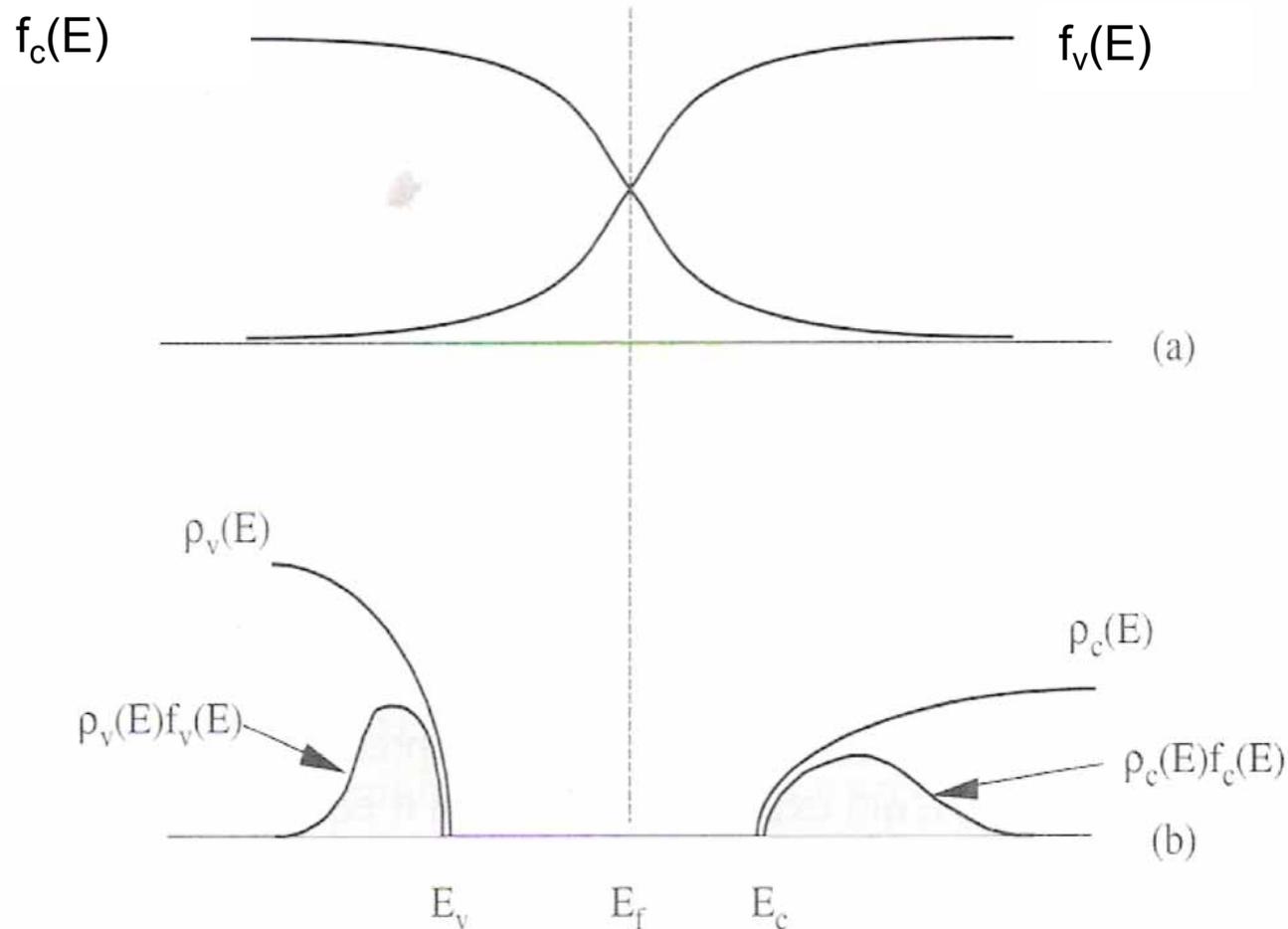
$$n_v(E) = f_v(E)D_v(E) = [1 - f_c(E)]D_v(E)$$

La concentration totale en électrons (trous) dans la bande de conduction (valence) s'obtient en intégrant la densité de porteur $n_{c(v)}$ sur l'ensemble de la bande de conduction (valence), soient

$$n_c = \int_{E_c}^{\infty} D_c(E) f_c(E) dE$$

$$n_v = \int_{E_v}^{\infty} D_v(E) f_v(E) dE = \int_{E_v}^{\infty} D_v(E) [1 - f_c(E)] dE$$

Occupation des bandes



Niveau de Fermi au milieu du gap

Semiconducteur non dégénéré

Semiconducteur non dégénéré \Rightarrow le niveau de Fermi se situe dans la bande interdite, et plus particulièrement, proche du centre

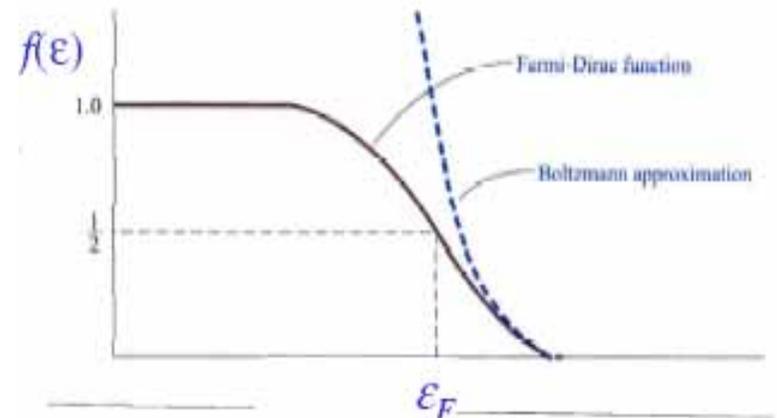
Nous avons alors $|E-E_F| \gg kT$ (Si à 300K: $k_B T=25$ meV comparé à $E_g/2=550$ meV)

\Rightarrow approximation de Boltzmann (cas où le nombre de porteurs est suffisamment faible pour que le principe d'exclusion de Pauli n'ait pas à être appliqué). La statistique d'occupation devient

$$f_c(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_F)/kT}} \Rightarrow f_c(E) \approx e^{-\cancel{(E-E_F)}/kT}$$

$$f_v(E) = 1 - f_c(E) \approx e^{-\cancel{(E_F-E)}/kT}$$

notez la différence de signe !



Semiconducteur non dégénéré

Après intégration:

$$n_c = \int_{E_c}^{\infty} D_c(E) f_c(E) dE \quad \Rightarrow \quad n = N_c e^{(E_F - E_c) / kT}$$

$$n_v = \int_{E_v}^{\infty} D_v(E) f_v(E) dE \quad \Rightarrow \quad p = N_v e^{(E_v - E_F) / kT}$$

$$N_{c(v)} = 2 \left(\frac{2\pi m_{c(v)}^* / m_0 k_B T}{\hbar^2} \right)^{3/2} \propto \left(\frac{m_{c(v)}^*}{m_0} T \right)^{3/2} \quad \text{Attention } N_{c(v)} \text{ dépend de } T !$$

$$= 2.5 \cdot 10^{19} \left(\frac{m^*}{m_0} \frac{T(K)}{300} \right)^{3/2} \text{ cm}^{-3}$$

$N_{c(v)}$ sont les densités effectives d'états

Semiconducteur non dégénéré

Densité effective d'états \Rightarrow une bande se représente comme un niveau discret de concentration N_C dont le peuplement dépend de la probabilité $\exp[-(E_C - E_F)/k_B T]$

Densités effectives d'états ($N_{C(V)}$) à 300 K pour différents semiconducteurs

	N_C (10^{19} cm^{-3})	N_V (10^{19} cm^{-3})
Si	2.7	1.1
Ge	1	0.5
GaAs	0.04	1.3

Statistique d'occupation des bandes d'énergie

pause historique



E. Fermi (1901-1954)



A.M. Dirac (1902-1984)

<http://nobelprize.org/physics/laureates/1938/fermi-bio.html>

<http://nobelprize.org/physics/laureates/1933/dirac-bio.html>

Loi d'action de masse

$$n = N_c e^{(E_F - E_c) / kT}$$

$$p = N_v e^{(E_v - E_F) / kT}$$

⇒

$$np = N_c N_v e^{-\frac{(E_c - E_v)}{k_B T}} = N_c N_v e^{-\frac{E_g}{k_B T}} = n_i^2$$

indépendant de E_F

n_i : concentration de porteurs intrinsèque

dépend de T , N_c , N_v et E_g

Niveau intrinsèque

Un semiconducteur idéalement pur est appelé **intrinsèque**

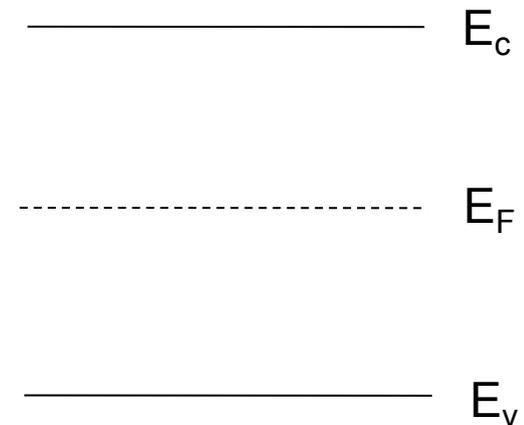
Electrons et trous ne proviennent que de l'excitation thermique

La condition de neutralité électrique impose à l'équilibre $n = p$

$$n = p = n_i = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{E_g}{2kT}}$$

$$E_F = (E_v + E_c) / 2 + kT \ln \sqrt{N_v / N_c}$$

N_v et N_c peu différents



Position du niveau de Fermi vers le milieu du gap

Cette position particulière du niveau de Fermi s'appelle le **niveau intrinsèque: E_i**

Niveau intrinsèque

Il est parfois utile d'exprimer n et p en fonction de E_i et E_F

$$E_i = \frac{(E_c + E_v)}{2} + k_B T \ln \sqrt{\frac{N_v}{N_c}}$$

$$n = N_c e^{(E_F - E_c)/kT}$$

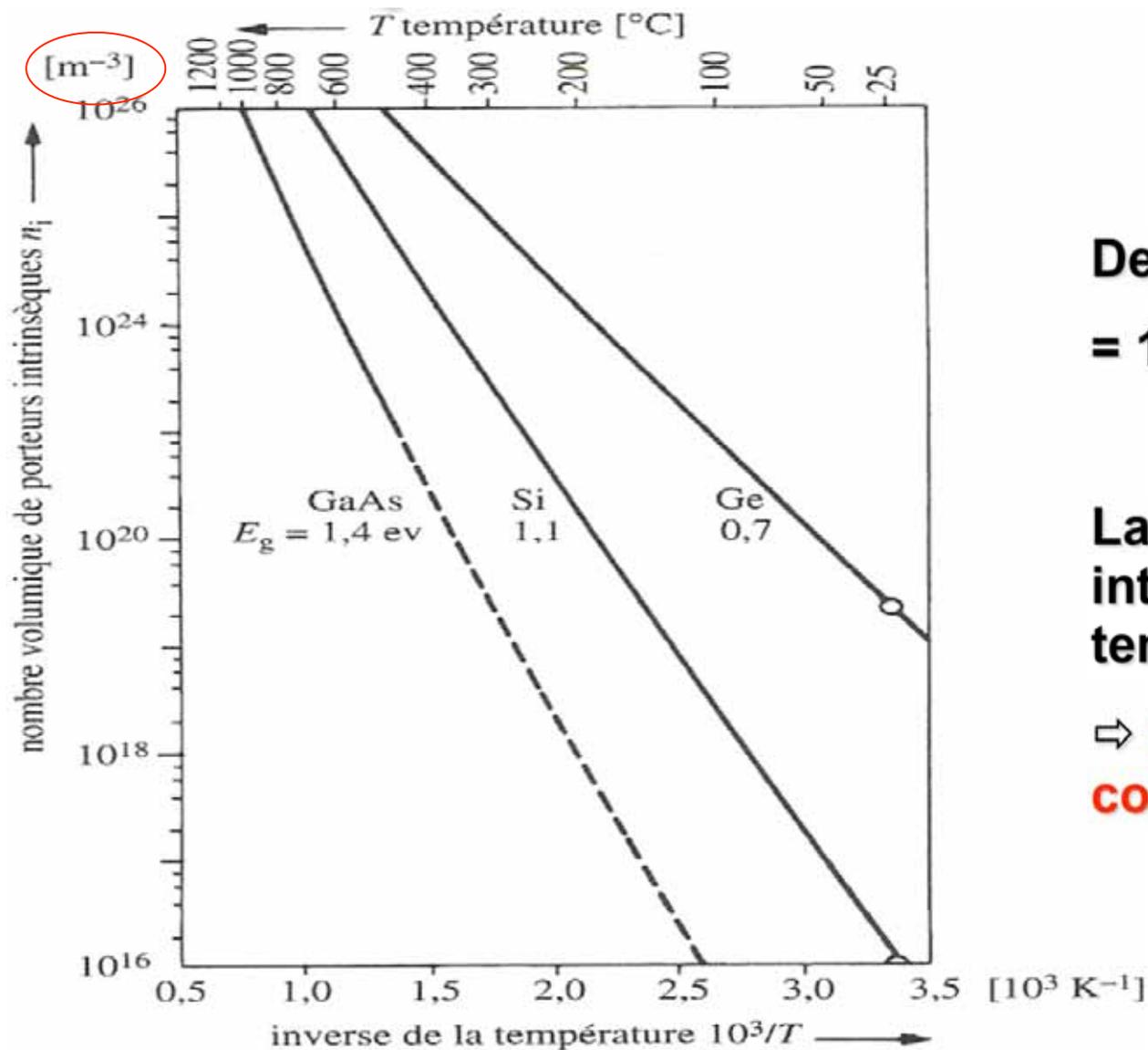
\Rightarrow

$$p = N_v e^{(E_v - E_F)/kT}$$

$$n = n_i e^{\frac{(E_F - E_i)}{k_B T}}$$

$$p = n_i e^{\frac{(E_i - E_F)}{k_B T}}$$

Semiconducteur intrinsèque



Densité de porteurs
= 10^{10} cm^{-3} pour Si

La densité de porteurs
intrinsèques très faible à
température ambiante

⇒ **Contrôle de la
conductivité par dopage**

Concentrations de porteurs

Charges

Symbole	Nature	Charge
N_A	densité d'accepteurs	0
N_A^-	densité d'accepteurs ionisés	-e
N_D	densité de donneurs	0
N_D^+	densité de donneurs ionisés	+e
n	électrons	-e
p	trous	+e

Neutralité électrique

$$n + N_A^- = p + N_D^+$$

Donneurs et accepteurs complètement ionisés à 300 K:

$$N_A^- = N_A$$

$$N_D^+ = N_D$$

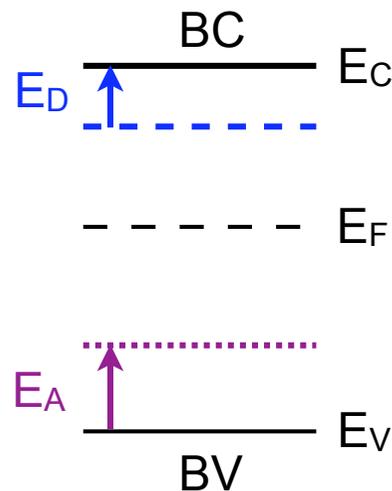
$$n + N_A = p + N_D$$

Statistique d'occupation des niveaux donneurs et accepteurs

Les fonctions de distributions sont un peu différentes des distributions de Fermi-Dirac

Admettre

Donneurs

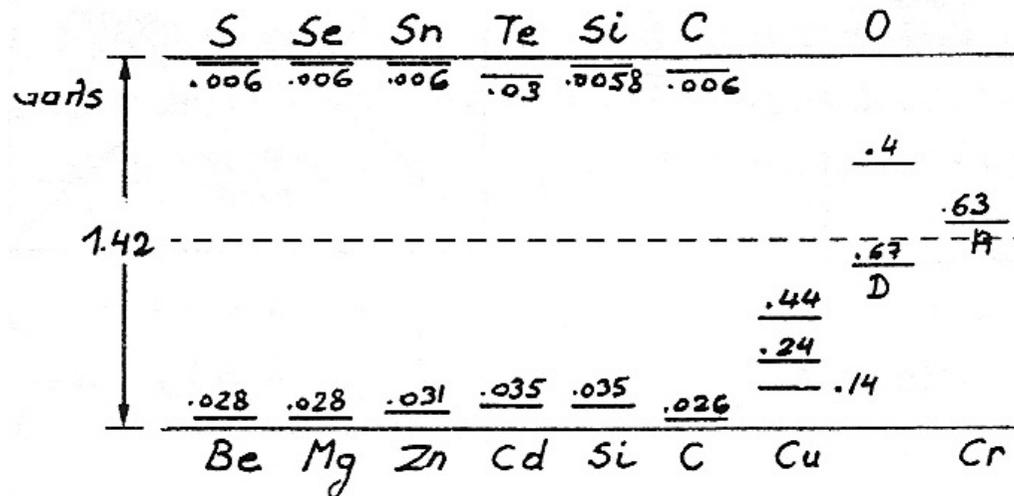
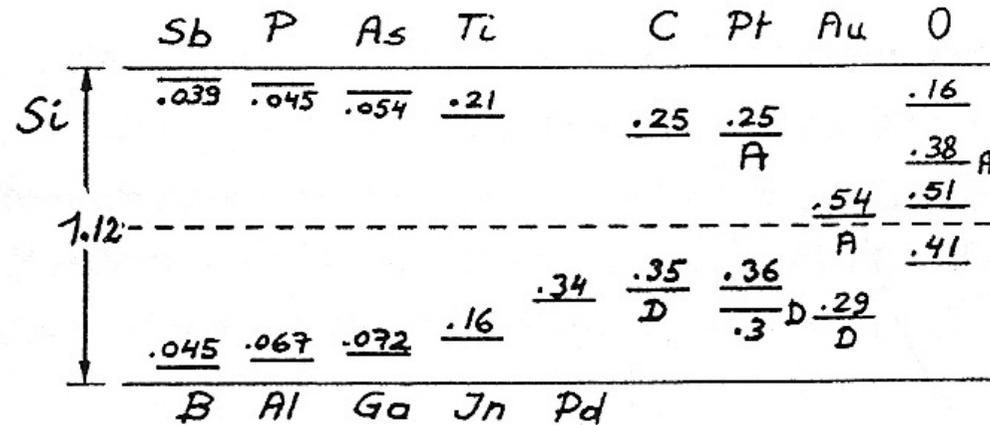


Accepteurs

$$f_D(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} e^{\frac{(E_C - E_D - E_F)}{k_B T}}}$$

$$f_A(E) = \frac{1}{1 + 4 e^{\frac{(E_V + E_A - E_F)}{k_B T}}}$$

Niveaux donneurs et accepteurs



Avec la neutralité électrique et les statistiques d'occupation on a suffisamment d'équations pour calculer n , p , N_D^+ et N_A^-

Semiconducteur de type n

Evolution avec la température

N_D donneurs ($N_A = 0$) avec une énergie d'ionisation E_D petite (les porteurs sont tous ionisés à 300K)

A T= 0K: pas de porteurs dans la bande de conduction

$$n = 0, p = 0$$

Température intermédiaire:

Les donneurs sont tous ionisés mais les électrons provenant de la bande de valence par ionisation thermique sont négligeables $\Rightarrow n = N_D$

$$\cancel{n + N_A} = \cancel{p} + N_D$$

Semiconducteur de type n

Evolution avec la température

Au-delà d'une certaine température, l'ionisation intrinsèque ne peut plus être négligée. Nous aurons alors la condition de neutralité suivante

$$n = N_D + p \qquad np = n_i^2$$

Pour le régime des températures intermédiaires ($n_i \ll N_D$)

$$n \approx N_D \quad \text{et} \quad p \approx \frac{n_i^2}{N_D}$$

Régime de saturation

Régime de saturation

- Le domaine où le nombre d'électrons est égal à N_D est appelé le **régime de saturation**
- Le nombre de trous étant très faible comparé au nombre d'électrons, ces derniers sont appelés **porteurs majoritaires**, alors que les trous sont les **porteurs minoritaires**
- **La conductivité dépend seulement de la concentration en donneurs. C'est ce qu'on appelle la conductivité extrinsèque de type n**

Concentration en électrons et trous

3 domaines de température

I) Températures élevées (zone intrinsèque) : la concentration intrinsèque n_i devient plus grande que les concentrations nettes de dopants et la condition de neutralité se réduit à $n = p = n_i$

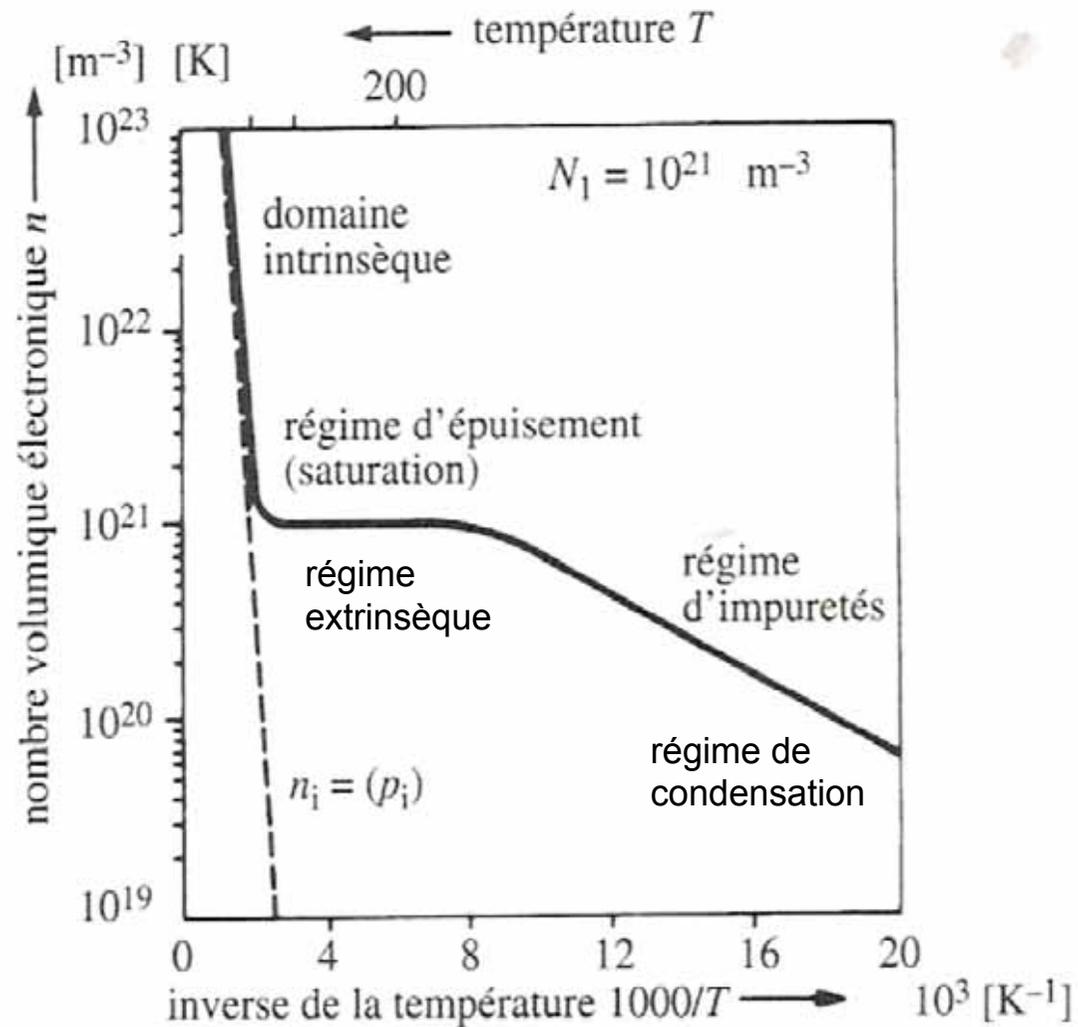
II) Températures moyennes (zone extrinsèque) : les donneurs et accepteurs sont complètement ionisés

$$n \approx N_D - N_A \approx \text{cte (dopage n)} \quad \text{et} \quad p \approx N_A - N_D \approx \text{cte (dopage p)}$$

III) basses températures (zone de condensation) : l'ionisation des impuretés devient incomplète (condensation des électrons sur les impuretés). La concentration des porteurs libre décroît suivant la relation

$$n + N_A^- = p + N_D^+$$

Concentration en électrons



Cas du semiconducteur dégénéré

Semiconducteur dégénéré = fortement dopé $\Leftrightarrow n > N_C$

$$E_F = E_c - kT \ln \frac{N_c}{n} \Leftrightarrow E_F > E_c$$

Le niveau de Fermi se trouve dans la bande de conduction

Distribution de Boltzmann plus valable. On considère alors une fonction échelon

$$f(E) = 1 \text{ pour } E < E_F$$

$$f(E) = 0 \text{ pour } E > E_F$$

$$n = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E_F - E_C)^{\frac{3}{2}}$$

Indépendant de T

Comportement métallique