SC

# 1 Rappels : structure

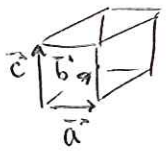
Si : struct diamant : cfc + 2 at/maille $(0,0,0)$ $(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4})$

$a = 5{,}43$ Å (Si)

$a = 5{,}65$ Å (AsGa)

ē du Si : onde $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ : $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ ; $e^{2\pi i \vec{k}\vec{r}}$ : $|\vec{k}| = \frac{1}{\lambda}$ } ntaO ≡

$\vec{k}$ ∈ espace réciproque → réseau réciproque

RD : 


RR : $\vec{A}, \vec{B}, \vec{C}$

tels que $\vec{A}\cdot\vec{a} = 1\,(2\pi)$

$\vec{B}\cdot\vec{b} = 1$

$\vec{C}\cdot\vec{c} = 1$

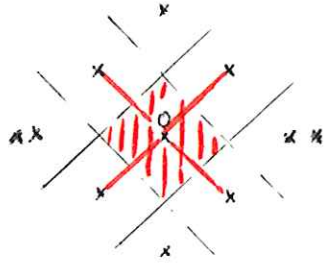
$\vec{A}\cdot\vec{b} = 0 \ldots$

$\vec{g} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}$

ds cfc : h, k, l m parité et entiers

Zone de Brillouin :

1re zone de Brillouin : élément de volume dont la périphérie est donnée par l'ens ds k plus proches diffractants de l'origine. diff pour $k = \frac{n\pi}{a}$



$[200]^*$ : $2A = 2/a$

$[111]^*$ : $\sqrt{3}\,A = \frac{\sqrt{3}}{a}$ → + court

→ $\pm\vec{A}$ $\pm\vec{B}$ $\pm\vec{C}$

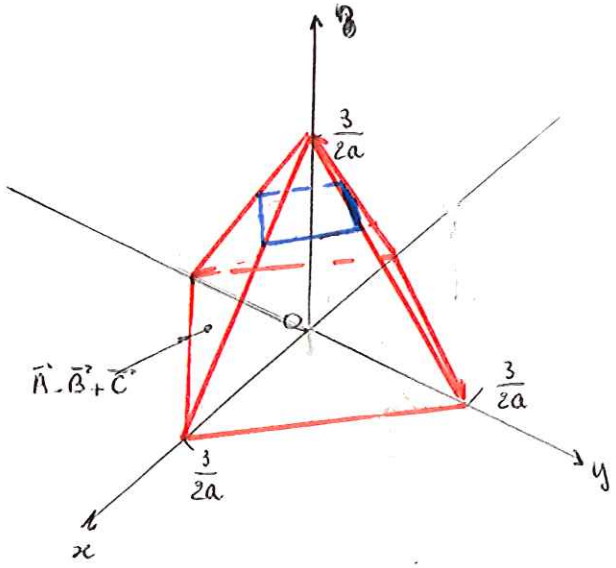
$\pm 2\vec{A}$

$\pm 2\vec{B}$

$\pm 2\vec{C}$

cfc (RD) → cc (RR)

$A = \frac{1}{a}$ sur $\langle 001 \rangle^*$




le plan médiateur de $\vec{A}+\vec{B}+\vec{C}$, de direc° $[1,1,1]^*$ et de la forme

$$x + y + z = d = \frac{3}{2a}$$

$$x = y = z = \frac{1}{2a}.$$

id pour $\vec{A}-\vec{B}+\vec{C}$ .... octaèdre régulier

plan médiateur du vecteur $2\vec{C}$ : distance $\frac{1}{a}$, donc à $\frac{2}{3}$ de $\frac{3}{2a}$

→ troncature en bleu

volume de la 1ère zone de Brillouin : $\frac{4}{a^3} = \left(\frac{a^3}{4}\right)^{-1}$

= inverse du volume de la maille RD.

## Etats électroniques

1 e⁻ ds le Si est décrit par sa fcO d'onde :

$\Psi(x,y,z,t)$ solu de l'équa de Schrödinger

$$H\Psi = E\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

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

si e⁻ stationnaire (ou à t) : $\Psi(xyzt) = \Psi(xyz)\, e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$

ds le Si, $\Psi$ peut s'écrire :

$$\Psi(xyz) = \frac{1}{\sqrt{V}}\, u_{\vec{k}}(xyz)\, e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

$u$ = fcO périodique (de m^ période que le cristal) de $\vec{k}$
$V$ = volume du cristal

ex : $u(xyz) = u(x+a, y, z) = u\left(x+\frac{a}{2}, y+\frac{a}{2}, z\right)$ ...

probabilité de présence d'1 e⁻ en 1 pt :

$$|\Psi|^2 = \frac{1}{V}|u_k|^2$$

→ l'e⁻ est délocalisé ds le cristal, la probabilité est la m^ de le trouver à n'importe quel endroit, elle varie périodiquement avec le cristal.

$\vec{k}$ ne peut pas prendre n'importe quelles valeurs.

$$\vec{k} = 2\pi \vec{g}$$

$\vec{g}$ est fini à l'intérieur de la 1ère zone de Brillouin.

$g = g_x g_y g_z$ telle que

$g_x g_y g_z$ multiples entiers de $\frac{1}{\sqrt[3]{V}}$

$$V = L^3 \Rightarrow \frac{1}{\sqrt[3]{V}} = \frac{1}{L}$$

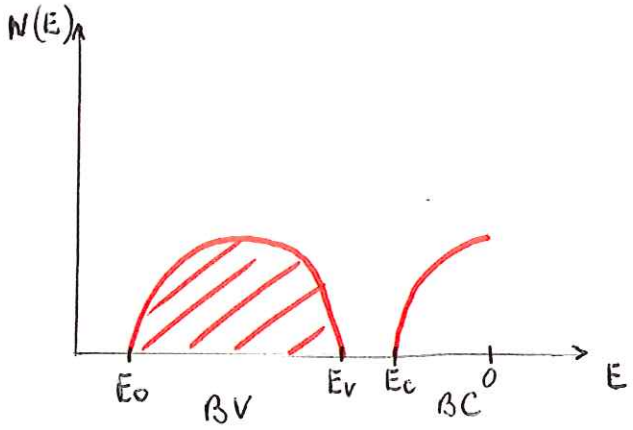
## densité d'états :

C'est le nb d'é dont l'E est comprise entre E et E + ΔE.

on a $\underline{dN = N(E)\, dE}$

N(E) = densité d'états.

N(E) est proportionnelle au nb d'atomes du cristal.




$E_c \simeq -4\ eV$

$E_v = E_c - 1{,}12\ eV$

$E_0 \simeq -17\ eV$

$N(E) = 0$ si $E < E_0$ ou si $E_v < E < E_c$

$\int_{E_0}^{E_v} N(E)\, dE$ = nb total d'états dont l'E est comprise entre $E_0$ et $E_v$.

= 4N (N = nb d'at contenus ds le cristal)

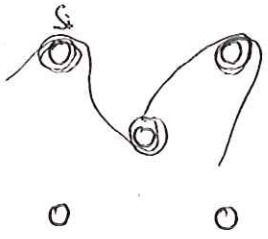
= nb d'$\bar{e}$ de valence

à OK : tous les états entre $E_0$ et $E_v$ sont pleins → bande de valence.

autres sont vides ($E > E_c$) → bande de conduct°.

$5.10^{22}$ at/cm³ → $2.10^{23}$ el/cm³ → $\Delta E \simeq 10^{-22}\ eV \simeq kT$

## Représentation de $\mu\vec{k}$




$\vec{E}/e^- \simeq 10^{10}$ V/m

→ autour de at, l'$e^-$ décrit ≃ les orbitales at de l'at libre.
pour Si : 3s et 3p

## Localisation des $e^-$ :

délocalisation = état propre : pas obligatoire.

mélange : $\Psi = \Psi_k(\vec{r})$ propre

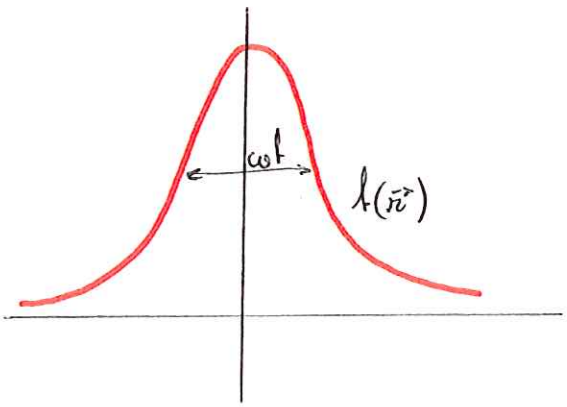
$\Psi = \sum a_k \Psi_k(\vec{r})$ état impropre

$$\Psi_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

$$\sum a_k \Psi_k = \frac{1}{\sqrt{V}} \iiint a_k e^{i\vec{k}\vec{r}} \, d^3\vec{k}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{V}} f(\vec{r})$$

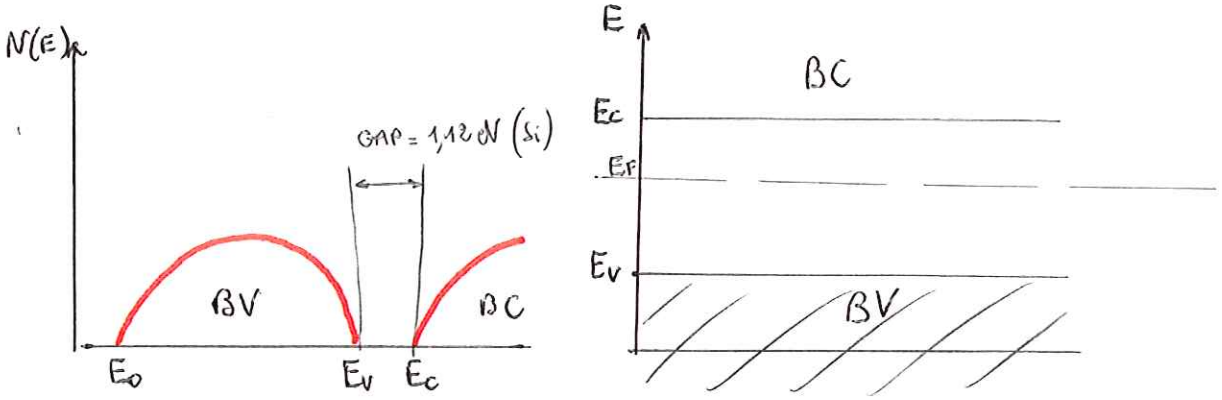
$f(\vec{r})$ transf de Fourier.
localisée au voisinage d'1 pt.




$\omega_a * \omega_f = 1$

Donc on a des $e^-$ avec 1 certaine incertitude sur l'E, en gardant le caractère quantique de celui ci. $\underbrace{e^{-\frac{r^2}{a^2}}}_{\text{écart à la "quanticité"}} e^{ik\vec{r}}$

## Niveau de Fermi




ds la bande de Valence pleine : si E (champ électrique) => changemt d'état d'1 ē = déplacement : bande pleine -> impossible

-> BV pleine ne conduit pas.

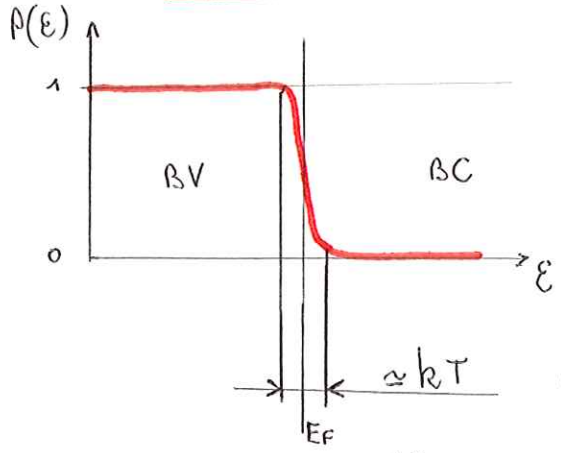
si présence d'1 bande de conduct° : possibilité de passage BV -> BC, vers les 1ers niveaux libres de BC, par excitat° thermique.

$$\frac{E_C - E_V}{kT} = 43{,}6 \quad \rightarrow \quad e^{-\frac{E_C - E_V}{kT}} \sim e^{-43{,}6} \sim 10^{-19}\ eV$$

mais ds 1 cm³ de Si : $2.10^{23}$ -> $2.10^{23} \cdot 10^{-19} \simeq 2.10^4$ conducteurs ⊖

probabilité de présence d'1 ē :

$$P(\mathcal{E}) = \frac{1}{e^{\frac{\mathcal{E}-\mathcal{E}_F}{kT}} + 1}$$




à 298 K : $kT = 0{,}026\ eV$

energie d'excitat° d'1 ē : $e^{-\frac{\Delta E}{kT}}$

pour qu'1 $e^-$ saute le gap, il faut : $\Delta E > 1,12$ eV

→ BV : $\rho(\mathcal{E}) \simeq 1$
BC : $\rho(\mathcal{E}) \simeq 0$
} donc $E_F$ ds la bande interdite.

BC : $e^{\frac{\mathcal{E}-E_F}{kT}} \gg 1 \rightarrow \rho(\mathcal{E}) \simeq e^{-\frac{\mathcal{E}-E_F}{kT}}$

<u>calcul de n :</u>

On a alors : $n = \int_{\mathcal{E}_c}^{\infty} N(\mathcal{E})\, \rho(\mathcal{E})\, d\mathcal{E}$ = $n^b$ d'$e^-$ ds la bande de conduct° ($n^b$ de porteurs).

↓ niveau d'E < 0 = niveaux d'E liés au cristal.

$$n = e^{\frac{E_F}{kT}} \int_{\mathcal{E}_c}^{0} N(\mathcal{E}) e^{-\frac{\mathcal{E}}{kT}}\, d\mathcal{E}$$

ou $n = N_c\, e^{\frac{E_F}{kT}}$ avec $N_c = \int_{\mathcal{E}_c}^{0} N(\mathcal{E})\, e^{-\frac{\mathcal{E}}{kT}}\, d\mathcal{E}$

ou $\boxed{n = N_c\, e^{-\frac{(E_c - E_F)}{kT}}}$ avec $\boxed{N_c = \int_{\mathcal{E}_c}^{\infty} n(\mathcal{E})\, e^{-\frac{\mathcal{E}-\mathcal{E}_c}{kT}}\, d\mathcal{E}}$ avec $\mathcal{E}_c = 0$ origine à la base de BC

$N_c$ = densité d'état effective ds la bande de conduct°.

<u>Si : $N_c = 2,8 \cdot 10^{19}\ cm^{-3}$</u>

Si $E_F$ s'éloigne de $E_c$, n subit 1 décroissance exponentielle.

$N_c$ dépend lentement de la T. (puissance $\frac{3}{2}$ de T) : on le considère ≠ de.

Donc en admettant que $E_c$ et $E_F$ ≠ de, on a $n = f(T)$.

Le $n^b$ de porteur n, varie rapidemt avec T, donc la résistivité du Si de même.

<u>calcul de p :</u>

A chaque transitio de $e^-$ ds BC, on crée 1 trou (porteur positif) ds BV. p peut être ≠ N !

dans BV : $\varepsilon - \varepsilon_F < 0$ ; $e^{\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}}$ petit $\rightarrow$ $P(\varepsilon) \simeq 1$

probabilité pour qu'1 état soit vide :

$$1 - P(\varepsilon) = 1 - \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}} + 1}$$

$$= \frac{e^{\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}}}{1 + e^{\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}}}$$

$$= \frac{1}{e^{-\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}} + 1}$$ tout ce passe à l'envers.

les trous de BV ont les mêmes propriétés que les $e^-$ de BC, les E seront comptés à l'inverse.

$\varepsilon < \varepsilon_F$, $\varepsilon - \varepsilon_F \simeq \frac{1}{2}$ gap $\rightarrow$ exp $\gg 1 \rightarrow$ $1 - P(\varepsilon) \simeq e^{\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}}$

donc $$p = \int_{BV} N(\varepsilon)\left(1 - P(\varepsilon)\right) d\varepsilon$$

$$= \int_{BV} N(\varepsilon)\, e^{\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}}\, d\varepsilon$$

$$= e^{\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}} \int_{BV} N(\varepsilon)\, e^{-\left(\frac{\varepsilon_V-\varepsilon}{kT}\right)}\, d\varepsilon$$

$\rightarrow$

$$\boxed{p = N_V\, e^{-\frac{\varepsilon_F-\varepsilon_V}{kT}}}$$

$$\boxed{N_V = \int_{BV} N(\varepsilon)\, e^{-\frac{\varepsilon_V-\varepsilon}{kT}}\, d\varepsilon}$$

Si : $N_V = 1{,}02 \cdot 10^{19}\ cm^{-3}$

$N_V$ = densité d'état effective de BV.

## NoO de trou

On suppose 1 cristal de $5.10^{22}$ at ($1cm^3$) de Si.

expérimentalement :

1 trou de BV → 1 $e^-$ de BC (conducteur négatif)

↳ comportement de conducteur positif : pseudo particule mobile,
de charge $+1,6.10^{-19}C$
et de masse $\simeq m_{e^-}$

de 1 champ : $\vec{F} = q\vec{E} = m\vec{\gamma}$

la conduct° électrique, sous 1 champ $\vec{E}$ est donc la mobilité des $e^-$, mais aussi celle des trous.

## Calcul de $E_F$

$$p = N_V \, e^{+\frac{E_V - E_F}{kT}}$$

$$n = N_C \, e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}}$$

pour $n = p$ ⇒

$$N_V \, e^{\frac{E_V}{kT}} e^{-\frac{E_F}{kT}} = N_C \, e^{-\frac{E_C}{kT}} e^{\frac{E_F}{kT}}$$

→ $$\boxed{E_F = \frac{E_V + E_C}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_V}{N_C}} = -4,56 \text{ eV (Si)}$$

terme petit :

→ $E_F$ est $\simeq$ au milieu de la bande interdite, ce qui confirme la approxima° précédente.

## Loi d'act° de masse

$$\boxed{n\,p = N_C N_V \, e^{-\frac{E_C - E_V}{kT}}} = 3,27.10^{19} \text{ (Si)}$$

Si $n \nearrow$ : $p \searrow$ d'autant : variaθ corrélée.

Si pur : $n = p = \sqrt{N_c N_v}\, e^{-\frac{E_c - E_v}{2kT}} = n_i$

$n_i$ = concentraθ intrinsèque de porteur : Si $\simeq 10^{10}\ cm^{-3}$ $(5{,}72 \cdot 10^{9}\ cm^{-3})$

La conductivité du Si doit être multipliée par 2 tous les 10° en T.

## Semi cond extrinsèque

Ajout d'autres at que le Si → dopage

L'1 des dopants les + utilisés = P : colonne V

Par diffusion : ouverture d'oxyde de P (gaz $POCl_3$)

O → $SiO_2$ et P dans $SiO_2$

T = 900°C → P diffuse thermiquement.

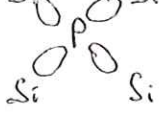
Par implantaθ : par $PH_3$ ($PH_2^+$) : accélératθ des ions sous 45 - 150 kV

cible = Si.

Soit $N_D$ at de P : $10^{18} - 10^{16}\ cm^{-3}$

leur inclusion modifie profondément les propriétés électriques.

Si : 4 $e^-$ de val
P : 5 $e^-$ de val
} 1 P prend la place de Si :




en 1ère approximaθ : P ne modifie pas la structure des niveaux d'E.

apport de 4 $e^-$ de val → BV
+ 1 $e^-$ de val → BC → délocalisé → $P^{5+}$ + 1 $e^-$ déloc.

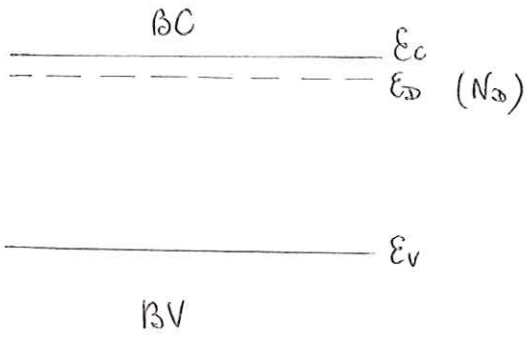
≃ Hydrogène

en 2e approximaθ : il apparaît 1 niveau d'E hydrogénoïde au voisinage de l'at de P. Ce niveau est localisé et caractérisé par 1 E : à 44 meV du bord de la bande C, donc

dans la bande interdite.

En Σ : structure de bande = structure du Si
+ Nd niveaux localisés ds le gap et à 44 meV du fond de BC.

<u>équilibre thermique</u>




nb total d'e⁻ : $4N + N_D$

T = 0K : 4N e⁻ ds BV (pleine) → ne contribue pas à la conduct°.
$N_D$ e⁻ sur $\mathcal{E}_D$ → $N_D$ $\mathcal{E}_D$ occupés → ne contribue pas à σ puisque localisés
BC : vide.

→ cristal isolant : $E_F$ entre $\mathcal{E}_D$ et $\mathcal{E}_C$ (+0,5 eV)

T = 300 K : excitat° thermique : $kT = 25{,}8$ meV
autant de mal à exciter les e⁻ de BV vers BC.
beaucoup ☺ de mal pour exciter les e⁻ de $\mathcal{E}_D$ à $\mathcal{E}_C$ : 44 meV.

à partir de 200 K ≈, tous les niveaux donneurs sont délocalisés.
pourtant $kT \simeq 17{,}5$ meV : à cause du nb d'é ds $\mathcal{E}_D$, attract° de BC.

entre 200 et 500 K : donneur de BV → BC peu importants → $n = N_D$
> 500 K : BV → BC → Nd + e⁻ Si

On peut faire varier avec T, la [.] en nb de porteurs. Les relat° précédentes restent valable :

$$n = N_C \exp -\frac{(E_C - E_F)}{kT} = N_D$$

→ accès à $E_F$

$$np = N_C N_V \exp -\left(\frac{E_C - E_V}{kT}\right) = n_i^2$$

→ accès au nb de trous p.

$N_D \simeq 10^{16}\ cm^{-3}$
$n_i \simeq 10^{10}\ cm^{-3}$
} → $E_C - E_F = 0{,}25$ eV

→ $p \simeq 10^4 cm^{-3}$

→ pour 1 SC dopé n : $E_F$ est considérablement ↗, et p est négligeable.

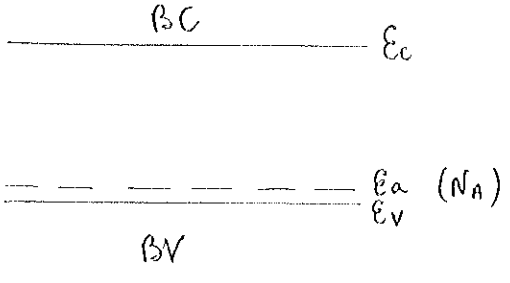
d'autres dopants : As (N - pratique)

Elém^t de la colonne III : B, Al, Ga, In : accepteurs

$rB\downarrow$ → $BF_3$ → pénétrant facile.

pour les accepteurs, la structure de bande n'est pas modifiée.

→ niveaux situés près de BV.




nb total d'é : $4N - N_A$

à OK : tous les états de BV pleins, tous les niveaux accepteurs (localisés) sont

vide. (BC et $E_a$)

$T = 0K$ : cristal isolant : BV pleine ; autres niveaux vide.

à partir de $T \simeq 200K$ et jusqu'à $\sim 500K$ :

tous les niveaux accepteurs ont pris 1 $e^-$ à BV, ils se retrouvent à 1 état localisé. A chaque passage $e^-_{BV} \to E_A$, il y a 1 trou de plus ds BV.

$\to \quad p = N_A$

$\to E_F \sim 0{,}25 eV$

$\to n \sim 10^4 cm^{-3}$ négligeable.

éléments col 5 : $\to E_D \quad n = N_D \quad p \sim 0$

éléments col 3 : $\to E_A \quad p = N_A \quad n \sim 0$

si on met les 2 :

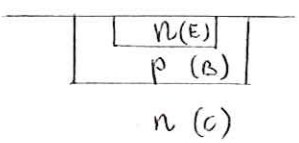
$N_D > N_A$ : cristal SC n : dopage $N_D - N_A$

$N_A > N_D$ : — SC p : — $N_A - N_D$

fabrication d'1 jonction pn : départ d'1 cristal de silicium dopé n ou p

→ diff de p ou n.

fabrication d'1 transistor npn :




remplacement des cristaux intrinsèques : cristaux compensés jusqu'à $N_A - N_D \simeq 0$

Métaux

Inclusion de métaux ds Si : apport de niveaux profond (entre BC et BV), qui

dégradent le Si. → précauθ à prendre.

métaux encrageux : Au et Cu

→ salle blanche