

Chapitre 2

Influence de la température sur la position du niveau de Fermi

2.1. Introduction

Il est très important de connaître la position du niveau de Fermi, puisque cette position détermine d'une part la concentration des porteurs libres, qui conditionne toutes les propriétés de transport du cristal, et d'autre part l'état de charge des additifs.

Le niveau de Fermi est immédiatement situé quand on connaît le type et la concentration des porteurs majoritaires, à la suite d'une mesure d'effet Hall.

En pratique, le problème le plus complexe est de prévoir la position du niveau de Fermi à une température donnée, dans un cristal contenant des concentrations données d'additifs. Ce problème peut être résolu au moyen de l'équation de neutralité électrique.

2.2. Equation de neutralité électrique

La neutralité électrique d'un cristal semi-conducteur est toujours assurée que ce soit à l'équilibre thermique ou en dehors de cet équilibre.

Supposons qu'on veuille construire un cristal semi-conducteur en disposant côte à côte des atomes de silicium et des atomes d'additifs. Pour y parvenir, il faut que l'ensemble des atomes soit électriquement neutre. Si en effet, on disposait côte à côte uniquement des ions positifs, la répulsion coulombienne ôterait toute cohésion au cristal. Le cristal étant construit, certains atomes peuvent s'ioniser soit par excitation thermique, optique, etc... ; soit en cédant des électrons à d'autres atomes, mais la neutralité électrique de l'ensemble n'en est pas falsifiée. Ces ionisations se traduisent par des transitions électroniques entre les niveaux intrinsèques ou extrinsèques du cristal.

L'équation de neutralité électrique écrit l'égalité de la somme des charges positives fixes ou mobiles, et de la somme des charges négatives fixes ou mobiles dans un semi-conducteur.

Soit un cristal homogène contenant simultanément des additifs donneurs (en concentration N_d) et accepteurs (en concentration N_a). A l'équilibre thermique, ce cristal n'est parcouru par aucun courant. Le champ électrique dans chaque élément de volume dv est nul, donc la charge totale contenue dans dv est nulle.

L'élément de volume dv contient en plus d'un grand nombre d'atomes neutres du cristal et des additifs :

- La concentration d'électrons libres (n) dont la charge correspondante est : $-q.n.dv$.
- La concentration des trous libres (p) dont la charge correspondante est : $q.p.dv$.
- La concentration d'atomes donneurs ionisés ($N_d^+ = N_d - N_d^0$) dont la charge correspondante est : $q.(N_d - N_d^0).dv$.
- La concentration d'atomes accepteurs ionisés ($N_a^- = N_a - N_a^0$) dont la charge correspondante est : $-q.(N_a - N_a^0).dv$.

On doit donc avoir : $q.(N_d - N_d^0).dv + q.p.dv - q.(N_a - N_a^0).dv - q.n.dv = 0$

D'où l'équation de neutralité électrique :

$$q.(N_d - N_d^0).dv + q.p.dv = q.(N_a - N_a^0).dv + q.n.dv$$

$$\implies q.dv((N_d - N_d^0) + p) = q.dv((N_a - N_a^0) + n)$$

$$\implies (N_d - N_d^0) + p = (N_a - N_a^0) + n$$

$$\implies n + N_d^0 - p - N_a^0 = N_d - N_a$$

Quand tous les additifs sont ionisés (température pas très basse) c'est-à-dire $N_d^0 = N_a^0 = 0$,

on a : $n - p = N_d - N_a$.

Si en particulier, $N_d = N_a$, on a : $n = p$, propriété caractéristique du cristal intrinsèque. Dans ce cas, on dit que le cristal est compensé ou pseudo-intrinsèque.

2.3. Semi-conducteurs intrinsèques

Un semi-conducteur intrinsèque est un semi-conducteur ne renfermant aucune impureté additive ($N_d=N_a=0$, de même $N_d^0 = N_a^0 = 0$), donc l'équation de neutralité :

$$n + N_d^0 - p - N_a^0 = N_d - N_a \text{ se réduit à : } n=p$$

$$\text{Ou bien } N_c \exp\left(\frac{E_F - E_c}{KT}\right) = N_v \exp\left(\frac{E_v - E_F}{KT}\right)$$

$$\Rightarrow E_F = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{KT}{2} \ln\left(\frac{N_v}{N_c}\right)$$

En remplaçant N_c et N_v par leurs expressions respectives, on obtient:

$$E_F = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3KT}{4} \ln\left(\frac{m_t^*}{m_e^*}\right)$$

Cette équation montre que le niveau de Fermi se situe au milieu de la bande interdite pour $T=0$ K, et que sa position varie en fonction de la température suivant la loi linéaire. A mesure que la température croît, le niveau de Fermi se rapproche de la bande d'énergie permise dont la densité d'états est la plus faible, et qui peut donc se remplir plus rapidement (**Figure 2.1**).

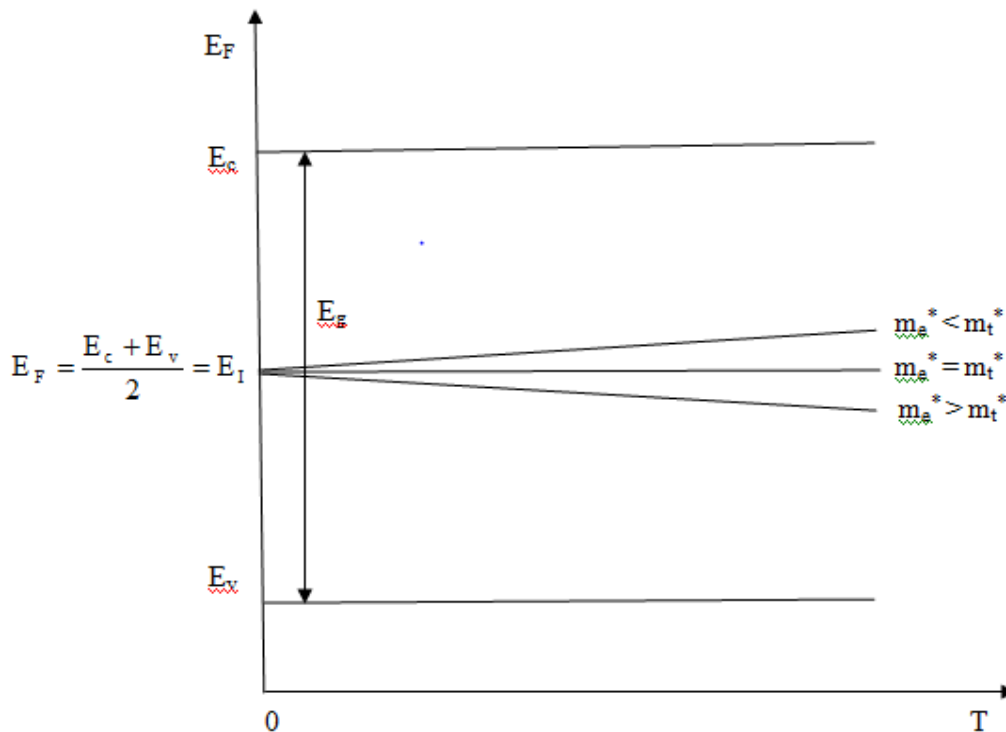


Figure 2.1 : Position du niveau de Fermi (d'un semi-conducteur intrinsèque) en fonction de la température.

2.4. Semi-conducteurs extrinsèques

Considérons un semi-conducteur dopé, par exemple avec un additif de type donneur, de sorte que $N_d \neq 0$ et $N_a = N_a^0 = 0$. L'équation de neutralité ($n + N_d^0 - p - N_a^0 = N_d - N_a$) se réduit à :

$$n - p = N_d - N_d^0 = N_d^+$$

Ou bien $n = p + N_d^+$

Cette dernière équation signifie que l'apparition des électrons libres est due, d'une part, aux transitions : bande de valence – bande de conduction, ce qui conduit à la création de p trous libres, et d'autre part, aux transitions : niveau d'additif - bande de conduction, ce qui produit N_d^+ ions d'additifs.

Chaque type de transitions est prédominant par rapport à l'autre selon qu'on se situe dans la gamme des basses, moyennes ou hautes températures.

On définit deux grands domaines de températures :

- Domaine des températures faibles ($0 - 400\text{ K}$), qui comprend les basses ($0 - 200\text{ K}$) et une partie des températures moyennes ($200 - 400\text{ K}$).
- Domaine des températures élevées ($> 400\text{ K}$), qui comprend une partie des températures moyennes ($400 - 600\text{ K}$) et les hautes températures ($> 600\text{ K}$).

Soit :

- Températures basses : $0 - 200\text{ K}$;
- Températures moyennes : $200 - 600\text{ K}$;
- Températures hautes : $> 600\text{ K}$.

Les valeurs des différents intervalles de températures sont données à titre approximatif, car la définition d'une température basse, moyenne ou haute, doit être liée au gap du matériau semi-conducteur et à la concentration en additifs. En effet, une température donnée pourra être considérée comme haute ou moyenne selon que le gap et la concentration en additifs sont petits ou grands. Lorsque le gap et la concentration en additifs sont petits, la température pourra être considérée comme haute, et lorsqu'ils sont grands, cette même température sera considérée comme moyenne.

2.4.1. Domaine des températures faibles

Dans ce domaine de température, ce sont les transitions d'électrons : niveau d'additif – bande de conduction, qui seront prédominantes et donc : $p \ll N_d^+$

D'où l'équation de neutralité ($n = p + N_d^+$) se réduit à : $n = N_d^+$

$$\text{Ou bien } N_c \exp\left(\frac{E_F - E_c}{KT}\right) = \frac{N_d}{1 + 2 \exp\left(\frac{E_F - E_d}{KT}\right)}$$

$$\implies \exp^2\left(\frac{E_F}{KT}\right) + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_d}{KT}\right) \cdot \exp\left(\frac{E_F}{KT}\right) - \frac{N_d}{2N_c} \exp\left(\frac{E_c + E_d}{KT}\right) = 0$$

$$\text{En posant : } X = \exp\left(\frac{E_F}{KT}\right)$$

$$\text{On aurait : } X^2 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_d}{KT}\right) \cdot X - \frac{N_d}{2N_c} \exp\left(\frac{E_c + E_d}{KT}\right) = 0$$

$$\text{Donc : } X = \frac{1}{4} \exp\left(\frac{E_d}{KT}\right) \left[\pm \sqrt{1 + \frac{8N_d}{N_c} \cdot \exp\left(\frac{E_c - E_d}{KT}\right)} - 1 \right]$$

$$\text{Par suite : } \exp\left(\frac{E_F}{KT}\right) = \frac{1}{4} \exp\left(\frac{E_d}{KT}\right) \left[\pm \sqrt{1 + \frac{8N_d}{N_c} \cdot \exp\left(\frac{E_c - E_d}{KT}\right)} - 1 \right]$$

Or, $\exp\left(\frac{E_F}{KT}\right)$ est toujours positif, donc le signe (-) devant le radical est dénué de sens.

En ne conservant que le signe (+), on trouve pour E_F :

$$E_F = E_d + KT \ln \frac{1}{4} \left[\sqrt{1 + \frac{8N_d}{N_c} \exp\left(\frac{E_c - E_d}{KT}\right)} - 1 \right]$$

2.4.1.1. Températures basses

Aux basses températures, on peut avoir l'inégalité : $\frac{8N_d}{N_c} \exp\left(\frac{E_c - E_d}{KT}\right) \gg 1$

Donc, à partir de l'expression précédente de E_F , on tire la position du niveau de Fermi :

$$E_F = \frac{E_c + E_d}{2} + \frac{KT}{2} \ln\left(\frac{N_d}{2N_c}\right)$$

La concentration d'électrons libres correspondante à cet intervalle de température s'obtient en remplaçant E_F par son expression dans celle de n , soit :

$$n = N_c \exp\left(\frac{E_F - E_c}{KT}\right) = N_c \exp\left(\frac{\frac{E_c + E_d}{2} + \frac{KT}{2} \ln\left(\frac{N_d}{2N_c}\right) - E_c}{KT}\right) = \sqrt{\frac{N_c N_d}{2}} \exp\left(\frac{E_d - E_c}{2KT}\right)$$

On remarque qu'aux basses températures la concentration des électrons est proportionnelle à la racine carrée de la concentration des additifs.

Cet intervalle de température correspond au domaine d'ionisation des additifs.

2.4.1.2. Températures moyennes

Aux températures moyennes, on peut avoir l'inégalité : $\frac{8N_d}{N_c} \exp\left(\frac{E_c - E_d}{KT}\right) \ll 1$

Or, on sait que $(1 + \varepsilon)^{\frac{1}{\alpha}} = 1 + \frac{\varepsilon}{\alpha}$ où $\varepsilon \ll 1$

Donc, à partir de l'expression générale de E_F pour le domaine des faibles températures, on en tire la position du niveau de Fermi :

$$E_F = E_c + KT \ln\left(\frac{N_d}{N_c}\right)$$

Dans cet intervalle de température: $N_c \gg N_d$, donc, E_F décroît lorsque la température croît.

La concentration des électrons libres correspondante à cet intervalle de température s'obtient en remplaçant E_F par son expression dans celle de n , soit :

$$n = N_c \exp\left(\frac{E_F - E_c}{KT}\right) = N_c \exp\left(\frac{E_c + KT \ln\left(\frac{N_d}{N_c}\right) - E_c}{KT}\right) = N_d$$

On remarque qu'aux températures moyennes, la concentration des électrons libres est indépendante de la température et égale à la concentration des additifs.

Cet intervalle de température est appelé : domaine d'épuisement des additifs.

Dans le domaine d'épuisement des additifs, la concentration des porteurs de charges majoritaires (dans notre cas : électrons) reste constante, tandis que la concentration des porteurs de charges minoritaires va croître rapidement avec la température, soit :

$$p = \frac{n_i^2}{n} = \frac{n_i^2}{N_d} = \frac{N_c N_v}{N_d} \exp\left(-\frac{E_g}{KT}\right).$$

2.4.2. Domaine des températures élevées

Dans ce domaine de température, tous les atomes additifs sont ionisés, donc il n'y a plus des transitions d'électrons : niveau d'additifs - bande de conduction. Par contre, les transitions d'électrons : bande de valence - bande de conduction deviennent de plus en plus importantes avec l'augmentation de la température. Par suite, l'équation de neutralité $n = p + N_d^+$ s'écrit : $n = p + N_d$

Et comme : $n \cdot p = n_i^2$

Donc : $n = \frac{n_i^2}{n} + N_d \rightarrow n^2 = n_i^2 + N_d n$

Ou bien : $n^2 - N_d n - n_i^2 = 0$

La résolution de cette équation donne:

$$n = \frac{N_d}{2} \left[1 \pm \sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_d^2}} \right]$$

Comme n est positif, donc le signe (-) n'a pas de sens, par suite :

$$n = \frac{N_d}{2} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_d^2}} \right]$$

D'autre part, $n = N_c \exp\left(\frac{E_F - E_c}{KT}\right)$

Donc, en égalisant les deux expressions, on trouve :

$$E_F = E_c + KT \ln \left\{ \frac{N_d}{2N_c} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_d^2}} \right] \right\}$$

2.4.2.1. Températures moyennes

Aux températures moyennes, les transitions d'électrons : bande de valence – bande de conduction n'arrivent pas à créer un nombre de trous égal à celui des électrons déjà existant (p

reste très inférieur à $n = N_d$), donc, on peut avoir l'inégalité : $\frac{4n_i^2}{N_d^2} \ll 1$

Par suite, à partir de l'expression générale de E_F pour le domaine des températures élevées, on en tire la position du niveau de Fermi :

$$E_F = E_c + KT \ln \left(\frac{N_d}{N_c} \right)$$

Dans cet intervalle de température : $N_c \gg N_d$, donc E_F décroît lorsque la température croît.

La concentration des électrons libres correspondante à ce domaine de température s'obtient en remplaçant E_F par son expression dans celle de n , soit :

$$n = N_c \exp \left(\frac{E_F - E_c}{KT} \right) = N_c \exp \left(\frac{E_c + KT \ln \left(\frac{N_d}{N_c} \right) - E_c}{KT} \right) = N_d$$

On remarque qu'il existe une parfaite concordance entre ces résultats (expressions de E_F et de n) et les résultats précédents dans le cas des températures moyennes.

Cet intervalle de température est appelé aussi : domaine d'épuisement des additifs.

Les deux intervalles de températures moyennes correspondent au domaine d'épuisement des additifs, soit :

- La limite inférieure du premier intervalle représente la température à partir de laquelle il n'y aurait plus d'ionisation des additifs (à cette température, tous les additifs sont ionisés) ;
- la limite supérieure du deuxième intervalle représente la température à partir de laquelle la concentration des trous devient égale à celle des électrons.

2.4.2.2. Températures hautes

Aux températures hautes, les transitions d'électrons : bande de valence – bande de conduction deviennent très importantes en créant un nombre de trous (donc d'électrons) nettement supérieur au nombre d'électrons créés par l'ionisation totale des additifs, donc $n=p \gg N_d$

Dans ce cas, on peut avoir l'inégalité : $\frac{4n_i^2}{N_d^2} \gg 1$

Donc, à partir de l'expression générale de E_F pour le domaine des températures élevées, on en tire la position du niveau de Fermi :

$$E_F = E_c + KT \ln \left(\frac{N_d}{2N_c} \cdot \frac{2n_I}{N_d} \right) = E_c + KT \ln \left(\frac{n_I}{N_c} \right)$$

En remplaçant n_I par son expression dans celle de E_F , on obtient :

$$E_F = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{KT}{2} \ln \left(\frac{N_v}{N_c} \right)$$

Ou bien :
$$E_F = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3KT}{4} \ln \left(\frac{m_t^*}{m_e^*} \right)$$

Dans cet intervalle de température, E_F a le même comportement avec la température que le niveau de Fermi d'un semi-conducteur intrinsèque.

La concentration des électrons libres correspondante à ce domaine de température s'obtient en remplaçant E_F par son expression dans celle de n , soit :

$$\begin{aligned} n &= N_c \exp \left(\frac{E_F - E_c}{KT} \right) = N_c \exp \left(\frac{\frac{E_c + E_v}{2} + KT \ln \left(\frac{N_v}{N_c} \right) - E_c}{KT} \right) \\ &= \sqrt{N_c N_v} \exp \left(-\frac{(E_c - E_v)}{2KT} \right) = \sqrt{N_c N_v} \exp \left(-\frac{E_g}{2KT} \right) = n_I = p \end{aligned}$$

Dans cet intervalle de température, la concentration des électrons est égale à celle des trous, donc le semi-conducteur à un comportement intrinsèque.

Cet intervalle de température correspond au domaine intrinsèque.

2.4.3. Variation du niveau de Fermi en fonction de la température

Les différentes expressions donnant la position de E_F en fonction de T pour les basses, moyennes et hautes températures ont été trouvées comme suit :

- Températures basses :
$$E_F = \frac{E_c + E_d}{2} + \frac{KT}{2} \ln \left(\frac{N_d}{2N_c} \right)$$

Dans cet intervalle de température : E_F varie avec la température comme suit :

- A $T=0$ K, le niveau de Fermi se situe à mi-chemin entre le bas de la bande de conduction et le niveau d'additif pentavalent.

- Pour des températures légèrement supérieure à 0 K : $N_d > 2N_c$, donc E_F augmente.
- Lorsque T croît, E_F croît. Arrivant à une température T_0 , E_F atteint son maximum, puis diminue quand T croît, car $N_c = f(T^{3/2})$ augmente plus rapidement que T . Lorsque $2N_c$ devient égal à N_d , E_F passe par le milieu de l'intervalle formé par le bas de la bande de conduction et le niveau d'additif (**Figure 2.2**).

- Températures moyennes : $E_F = E_c + KT \ln \left(\frac{N_d}{N_c} \right)$

Dans cet intervalle de température : $N_c \gg N_d$, donc, E_F décroît lorsque T croît.

- Températures hautes : $E_F = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{KT}{2} \ln \left(\frac{N_v}{N_c} \right)$

Dans cet intervalle de température, E_F a le même comportement avec la température que le niveau de Fermi d'un semi-conducteur intrinsèque.

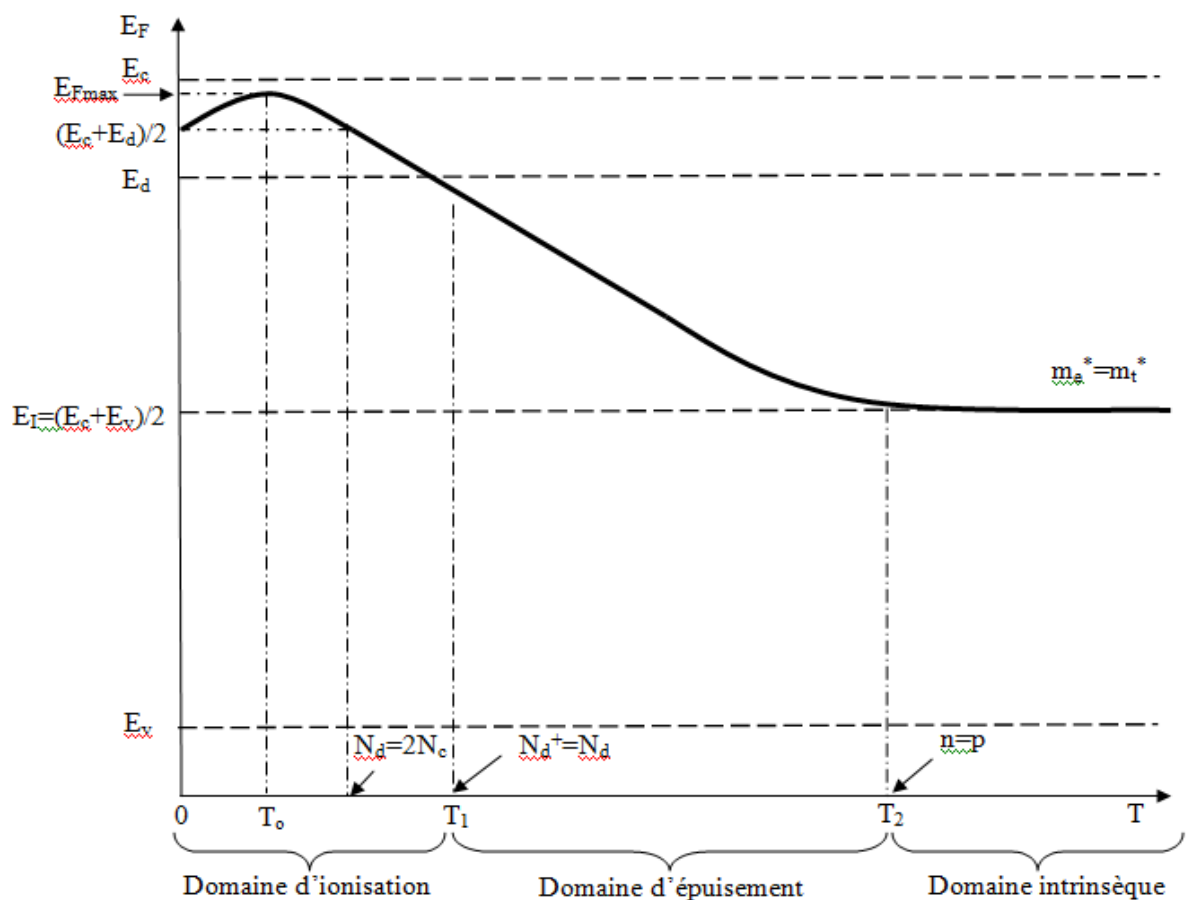


Figure 2.2 : Position du niveau de Fermi (d'un semi-conducteur de type N) en fonction de la température.

a) Température T_0 à laquelle le niveau de Fermi atteint son maximum

$$\text{On a : } E_F = \frac{E_c + E_d}{2} + \frac{KT}{2} \ln\left(\frac{N_d}{2N_c}\right) = \frac{E_c + E_d}{2} + \frac{KT}{2} \ln(N_d) - \frac{KT}{2} \ln(2N_c)$$

$$\text{Et, } N_c = 2 \left(\frac{2\pi K T m_e^*}{h^2} \right)^{3/2} = A T^{3/2}$$

Pour un extremum (dans notre cas un maximum), la dérivée première de E_F par rapport à T doit être nulle. De plus, lorsque E_F passe par un maximum T s'écrit T_0 .

Soit :

$$\frac{\partial E_F}{\partial T} = \frac{K}{2} \ln(N_d) - \frac{K}{2} \ln(2N_c) - \frac{KT_0}{2} \frac{\frac{3}{2} A T_0^{1/2}}{A T_0^{3/2}} = \frac{K}{2} \ln\left(\frac{N_d}{2N_c}\right) - \frac{3K}{4} = 0$$

$$\text{Donc } \ln\left(\frac{N_d}{2N_c}\right) = \frac{3}{2}$$

$$\text{Ce qui nous donne : } N_c = \frac{N_d}{2} \exp\left(-\frac{3}{2}\right)$$

$$\text{Et comme } N_c = 2 \left(\frac{2\pi K T_0 m_e^*}{h^2} \right)^{3/2} = A T_0^{3/2}$$

$$\text{Donc : } A T_0^{3/2} = \frac{N_d}{2} \exp\left(-\frac{3}{2}\right)$$

$$\text{Finalement, on obtient : } T_0 = \left[\frac{N_d}{2A} \exp\left(-\frac{3}{2}\right) \right]^{2/3}$$

b) Expression du niveau de Fermi ayant atteint son maximum

$$\text{on a : } E_F = \frac{E_c + E_d}{2} + \frac{KT}{2} \ln\left(\frac{N_d}{2N_c}\right)$$

$$\text{A } T=T_0, \quad E_F = E_{F_{\max}} = \frac{E_c + E_d}{2} + \frac{KT_0}{2} \ln\left(\frac{N_d}{2N_c}\right) = \frac{E_c + E_d}{2} + \frac{3KT_0}{4}$$

$$\text{Par suite : } E_{F_{\max}} = \frac{E_c + E_d}{2} + \frac{3KT_0}{4}$$

2.4.4. Variation de $\ln(n)$ en fonction de $1/T$

- Températures basses : $n = \sqrt{\frac{N_c N_d}{2}} \exp\left(\frac{E_d - E_c}{2KT}\right)$

$$\Rightarrow \ln(n) = \frac{E_d - E_c}{2KT} + \frac{1}{2} \ln\left(\frac{N_c N_d}{2}\right)$$

La variation de $\ln(n)$ avec la température dépend de la variation du deuxième terme du second membre, car sa valeur est plus importante.

$$\text{En effet, } N_c = 2 \left(\frac{2\pi K T m_e^*}{h^2} \right)^{3/2} = A T^{3/2}$$

Donc, lorsque la température croît, N_c augmente, ce qui entraîne la croissance de $\ln(n)$ (**Figure 2.3**).

- Températures moyennes : $n = N_d$

$$\Rightarrow \ln(n) = \ln(N_d) = \text{Constante}$$

- Températures hautes : $n = p = n_i = \sqrt{N_c N_v} \exp\left(-\frac{E_c - E_v}{2KT}\right)$

$$\Rightarrow \ln(n) = -\frac{E_c - E_v}{2KT} + \frac{1}{2} \ln(N_c N_v)$$

La variation de $\ln(n)$ avec la température dépend de la variation du deuxième terme du second membre, car sa valeur est plus importante.

$$\text{En effet, } N_c = N_v = A T^{3/2}$$

Donc, lorsque la température croît, N_c et N_v augmentent, ce qui entraîne la croissance de $\ln(n)$.

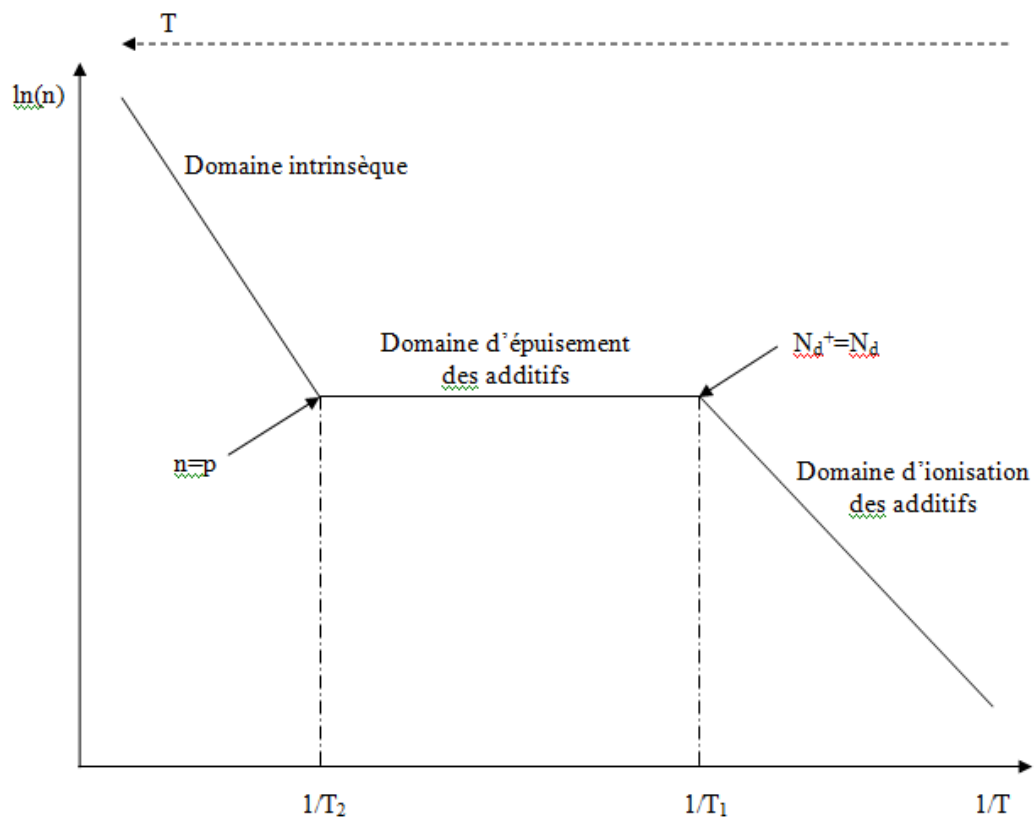


Figure 2.3 : Variation de la concentration des porteurs majoritaires (d'un semi-conducteur de type N) en fonction de la température.