

# Silidop version 1.0

## Simulation numérique des densités de porteurs et des diagrammes de bande de conduction et de bande de valence dans le silicium dopé N et P

---

### 1 - Matériaux semi-conducteurs

Les matériaux semi-conducteurs comme le silicium sont caractérisés par leur bande de conduction : les électrons y occupent des niveaux d'énergie  $E$  supérieure à un niveau  $E_c$  (bas de la bande de conduction), ainsi que par leur bande de valence : les trous y occupent des niveaux d'énergie  $E$  inférieure à  $E_v$  (haut de la bande de valence). La plage d'énergie entre  $E_v$  et  $E_c$  ne contient pas de porteurs libres (bande interdite = gap). La bande interdite peut contenir des niveaux donneurs ou accepteurs, obtenus par un dopage du silicium par des impuretés : par exemple, du bore pour obtenir du silicium de type P, du phosphore pour obtenir du silicium de type N. Dans un semi-conducteur de type N, ce sont les électrons, de charge négative, qui conduisent le courant, dans un semi-conducteur de type P, ce sont les trous, de charge positive, qui conduisent le courant. On peut également introduire des donneurs ou des accepteurs sur des niveaux profonds, avec des impuretés comme le palladium, par exemple pour rendre le semi-conducteur isolant.

### 2 - Description du simulateur [Silidop](#)

Ce simulateur traite des matériaux semi-conducteurs dopés homogènes, ce qui signifie que les concentrations de dopants sont les mêmes en tout point du volume du matériau. Le calcul proprement dit donne comme résultat la position relative de la bande de conduction  $E_c$  par rapport au niveau de Fermi  $E_f$  du matériau. Le niveau de Fermi sépare les états occupés par des électrons, d'énergies  $E$  inférieures à  $E_f$ , et les états non occupés, d'énergies  $E$  supérieures à  $E_f$ . La transition du taux d'occupation est brutale à basse température, et se fait sur une échelle de  $kT$  ( $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$  = constante de Boltzmann = constante des gaz parfaits  $R$  / constante d'Avogadro  $N_A$ , et  $T$  = température absolue en kelvin) d'une manière plus générale : fig 1.

On peut déduire de  $E_c - E_f$  les concentrations d'électrons et de trous libres, qui assurent la conduction électrique dans le matériau, ainsi que les taux d'ionisation des donneurs et des accepteurs. On peut trouver toute la théorie derrière ces calculs dans le livre "Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques" Henry Mathieu, Dunod 2001.

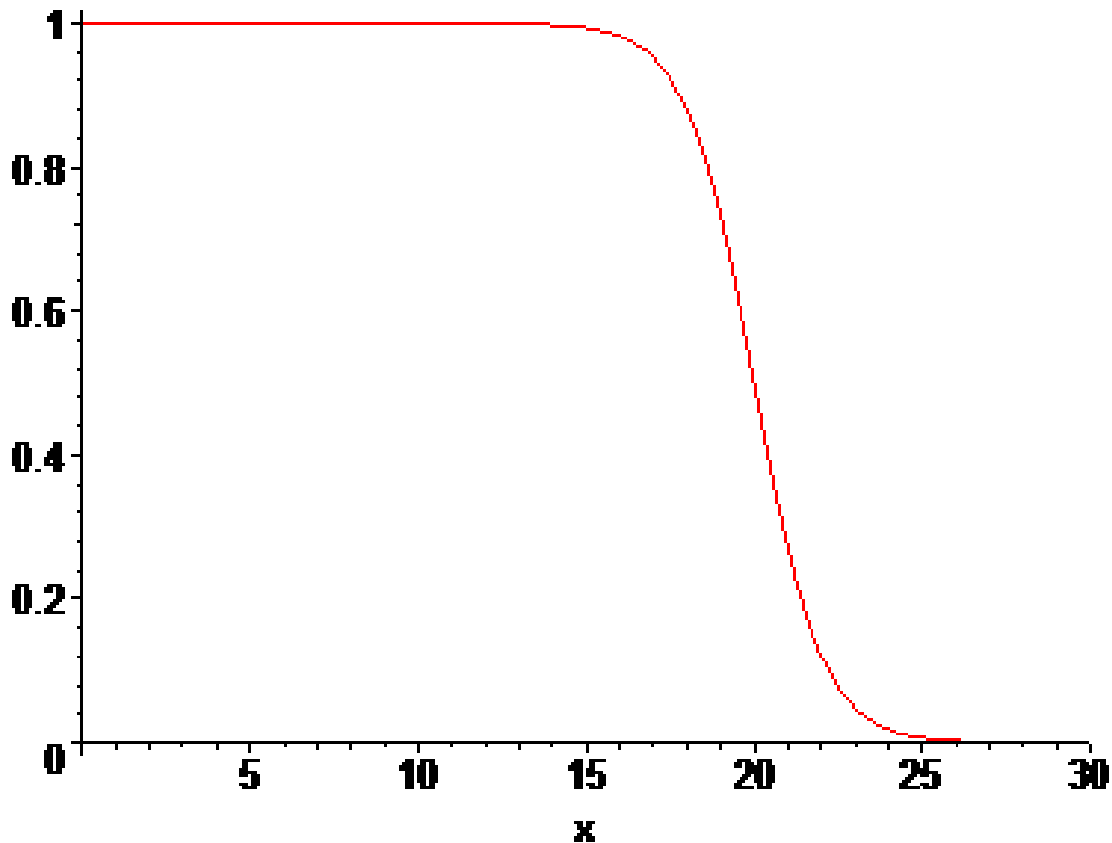


fig. 1 Fonction de Fermi  $f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{k \cdot T}\right)}$  avec, sur la figure,  $E_f = 20$  et  $kT = 1$ .

Ce simulateur permet de tester de nombreuses situations de dopage et de température, et permet d'appréhender très concrètement le comportement d'un matériau semi-conducteur, en particulier l'ionisation partielle des impuretés suivant la température et la position du niveau de Fermi.

### **A - Données**

Certaines données sont entrées dans le formulaire de la page HTML Silidop, d'autres plus spécifiques à chaque menu, dans des boîtes de dialogue qui apparaissent. Les valeurs par défaut sont relatives au silicium, mais le cas de tout autre matériau peut être simulé.

Les données nécessaires au calcul sont les suivantes :

- la largeur de bande interdite (gap) = 1,12 eV pour le silicium (1 eV = 1 électron.volt =  $1,6 \cdot 10^{-19}$  joule),
- la masse effective  $m_c$  des électrons = 1,06 .  $m_0$  en prenant en compte les 6 vallées du silicium et où  $m_0$  est la masse d'un électron libre =  $9,1 \cdot 10^{-31}$  kg,
- la masse effective  $m_v$  des trous = 0,59 .  $m_0$  en considérant trous lourds et trous légers,
- le nombre maximum d'itérations pour ne pas bloquer le calcul en cas problème. Plus la température T est basse, plus la convergence du calcul prend du temps,
- le seuil de convergence  $10^{-12}$  eV convient a priori. Le calcul est arrêté lorsque la valeur de  $E_c$  varie d'une quantité inférieure à ce seuil d'une itération à l'autre.

Ce simulateur peut prendre en compte 5 niveaux donneurs et 5 niveaux accepteurs. Chaque niveau est caractérisé par sa concentration en nombre d'impuretés par  $\text{cm}^3$ . Il reste souvent une concentration résiduelle minimale de l'ordre de  $10^{13}$  impuretés par centimètre cube et on peut doper jusqu'à des valeurs de l'ordre de  $10^{21}$  impuretés par  $\text{cm}^3$ .

Un dopant est également caractérisé par son énergie d'ionisation. Le niveau accepteur pour le bore (dopant de type P) est  $e_a = 0,045$  eV au dessus de  $E_v$  (niveau de la bande de valence). Un atome de bore introduit dans le cristal de silicium peut s'ioniser en capturant un électron de la bande de valence (et donc en libérant un trou qui peut conduire le courant), moyennant de lui fournir l'énergie  $e_a$ . Le niveau donneur pour le phosphore (dopant de type N) est  $e_d = 0,044$  eV en dessous de  $E_c$  (niveau de la bande de conduction). Un atome de phosphore introduit dans le cristal de silicium peut s'ioniser en cédant un électron, qui devient un électron libre capable de conduire le courant dans le silicium, si on lui fournit l'énergie  $e_d$ .

La statistique à laquelle obéissent les dopants contient un facteur de dégénérescence, 2 pour les donneurs dans le silicium, 1/4 pour les accepteurs. Ce paramètre peut être modifié.

Le palladium introduit comme dopant dans le silicium crée un niveau donneur à  $e_d = 0,8$  eV en dessous de la bande de conduction  $E_c$ , et 2 niveaux accepteurs à  $e_a = 0,24$  eV et  $e_a = 0,91$  eV au dessus de la bande de valence  $E_v$ .

## **B - Menus calculs**

1 - Le calcul peut se faire pour une valeur des concentrations en donneurs, une valeur des concentrations en accepteurs et une température  $T$  avec le bouton "Calcul matériau homogène".

On obtient en sortie les niveaux  $E_c$  et  $E_v$  par rapport au niveau de Fermi pris comme référence ( $E_f = 0$ ), ainsi que la concentration d'électrons libres  $n$  (en nombre d'électrons par  $\text{cm}^3$ ) et la concentration de trous libres  $p$  (en nombre de trous par  $\text{cm}^3$ ).

On peut tracer, après les avoir sélectionnées par les boutons "sel" puis copiées dans un tableur comme Libreoffice Calc, les densités d'états dans les bandes de valence et de conduction (c'est à dire le nombre de places qui peuvent être occupées par des électrons ( $N_c$ ) ou par des trous ( $N_v$ )) Fig. 2. L'énergie 0 correspond au niveau de Fermi pour un dopage N :  $N_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  et un dopage P :  $N_a = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . La branche de racine carrée à gauche correspond aux états de la bande de valence, et la branche de racine carrée à droite correspond aux états de la bande de conduction. Les deux branches sont séparées par la bande interdite entre  $E_v = -0,979$  eV et  $E_c = 0,141$  eV, soit un gap de  $E_c - E_v = 1,12$  eV pour le silicium. Ce diagramme dépend du gap et des masses effectives des trous et des électrons.

On peut également tracer  $p(E)$  (à gauche) et  $n(E)$  (à droite) pour les trous et les électrons fig. 3. Ce diagramme dépend du niveau de Fermi  $E_f$  et de la température  $T$ , donc des niveaux de dopage N et P. Pour la clarté, la bande interdite a été réduite d'un facteur 0,2.

Densités d'états dans la bande de valence et la bande de conduction  
Silicium : gap = 1,12 eV

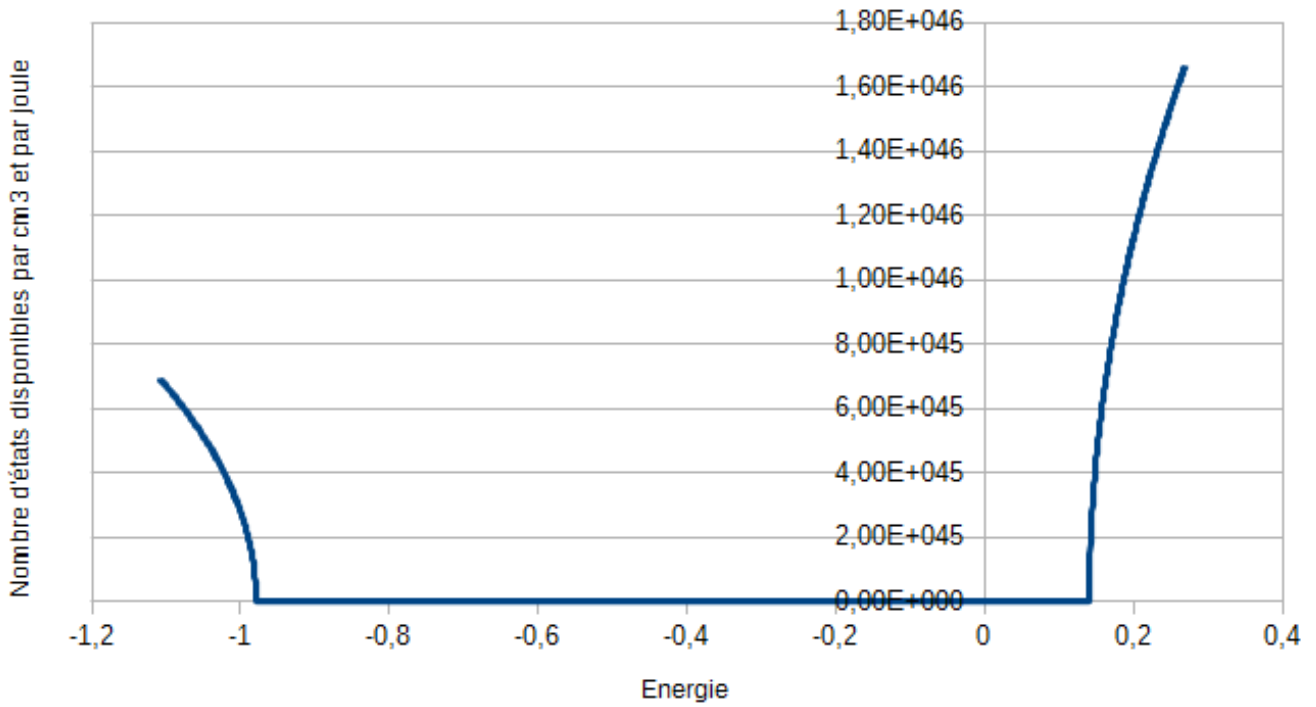


Fig. 2 Densités d'états dans la bande de valence (à gauche) et dans la bande de conduction à droite), séparées par la bande interdite (gap au centre).

$N_d = 10^{17} \text{cm}^{-3}$   $N_a = 1,00000001 \cdot 10^{17} \text{cm}^{-3}$

T = 300 K

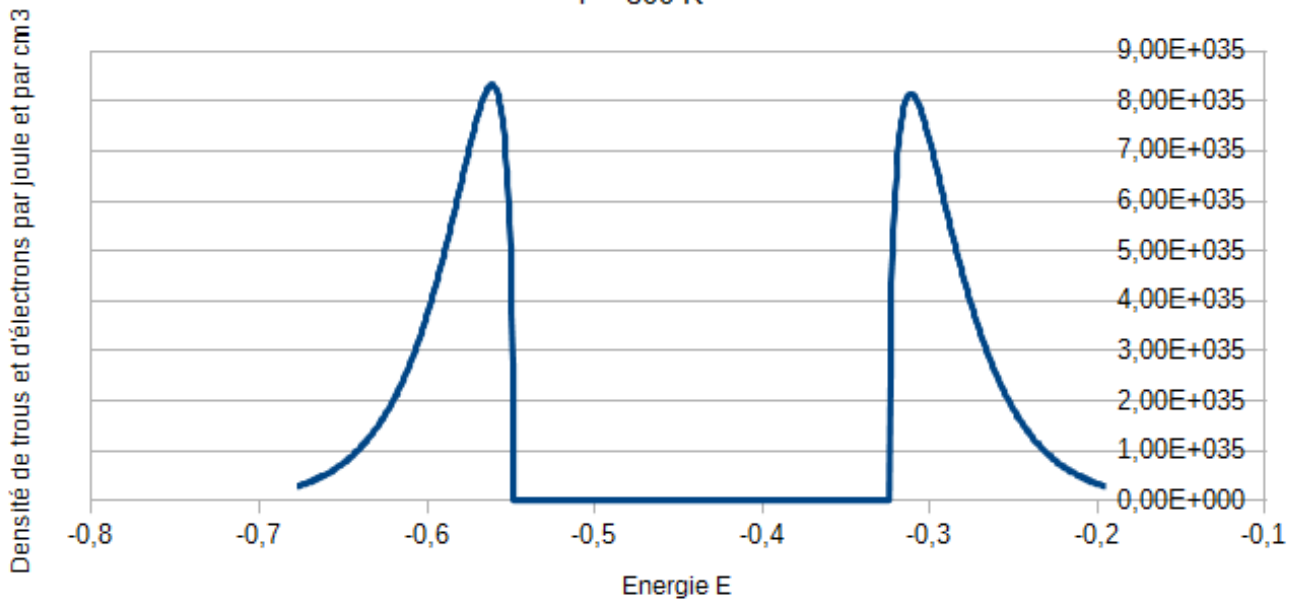


Fig. 3 densités de trous et d'électrons en fonction de leur énergie E

2 - Le bouton "courbe n(Nd)" permet d'effectuer le même calcul que précédemment, mais en faisant varier la concentration en donneur Nd entre deux valeurs. On peut tracer  $E_c$  et  $E_v$  en fonction de Nd, ainsi que les densités d'électrons et de trous libres, et les fractions d'impuretés ionisées.

3 - Le bouton "courbe p(Na)" fait la même chose, mais en faisant varier la concentration en accepteurs Na entre deux valeurs.

4 - Comme les concentrations peuvent varier de plusieurs ordres de grandeur, un tracé avec des échelles logarithmiques est plus lisible. "courbe log10 (n(log10(Nd)))" est équivalente à n(Nd), mais en log (une courbe entre  $10^n$  et  $10^m$  devient une courbe entre n et m).

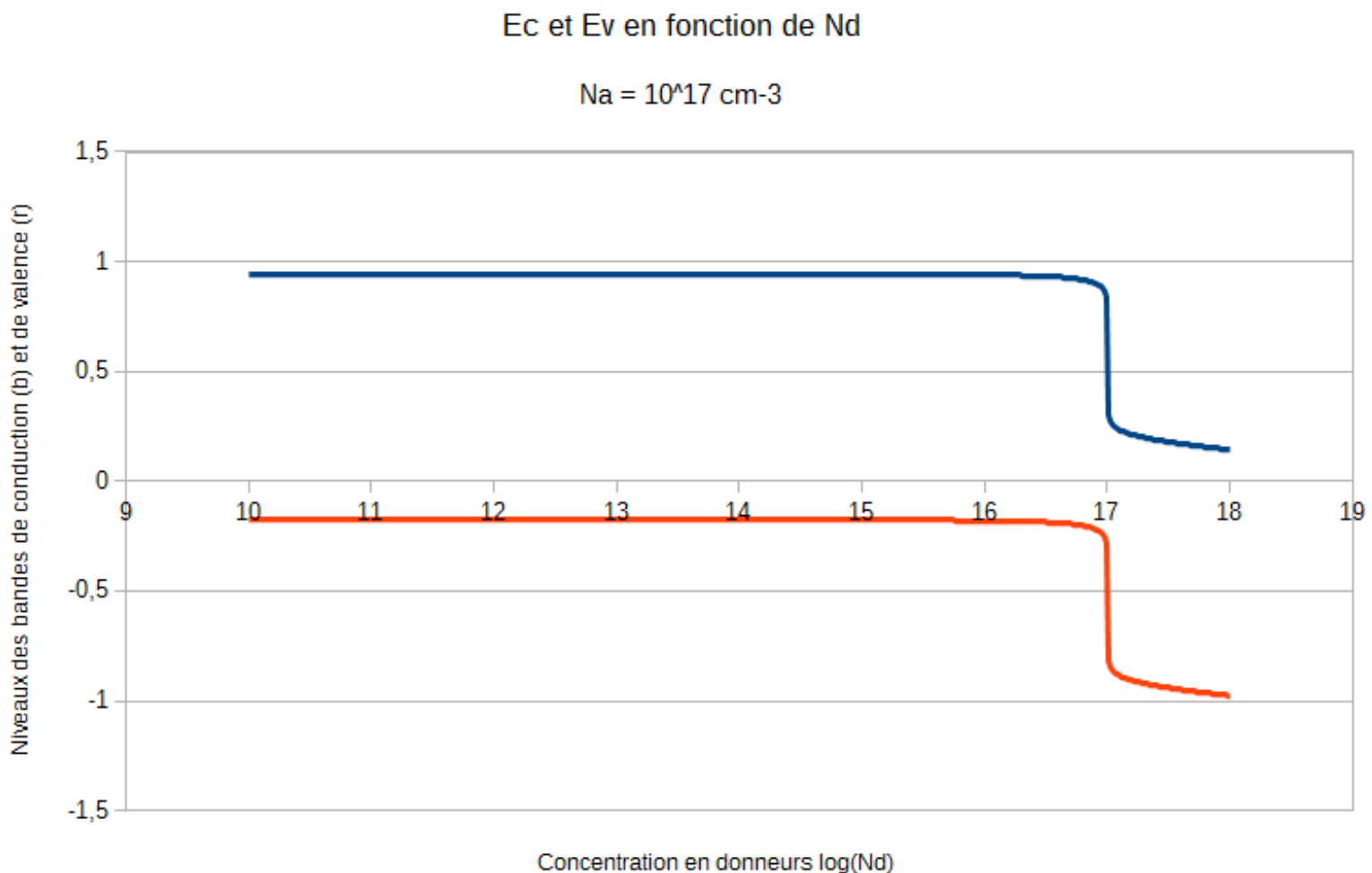


Fig. 4  $E_c$  en bleu et  $E_v$  en rouge en fonction de la concentration en donneurs Nd entre  $10^{10} \text{ cm}^{-3}$  et  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Comme la concentration en accepteurs Na a été fixée à  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , tant que  $Nd < 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , le semi-conducteur est globalement de type P à la concentration  $Na = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  : le haut de la bande de valence  $E_v$  est proche du niveau de Fermi  $E_f = 0 \text{ eV}$ . Lorsque  $Nd > 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , le semi-conducteur est globalement de type N à la concentration Nd et le bas de la bande de conduction  $E_c$  se rapproche du niveau de Fermi  $E_f = 0 \text{ eV}$ .

5 - "courbe log10 (p(log10(Na)))" permet de voir la variation des densités d'électrons et de trous en fonction de la concentration en accepteurs Na, avec des échelles logarithmiques.

- 6 - "courbe  $n(T)$ " permet de tracer en fonction de la température  $T$  :
- le niveau de la bande de conduction  $E_c$ ,
  - le niveau de la bande de valence  $E_v$ ,
  - la concentration  $n$  d'électrons libres dans la bande de conduction,
  - la concentration  $p$  de trous libres dans la bande de valence,
  - les fractions de donneurs et d'accepteurs ionisés.

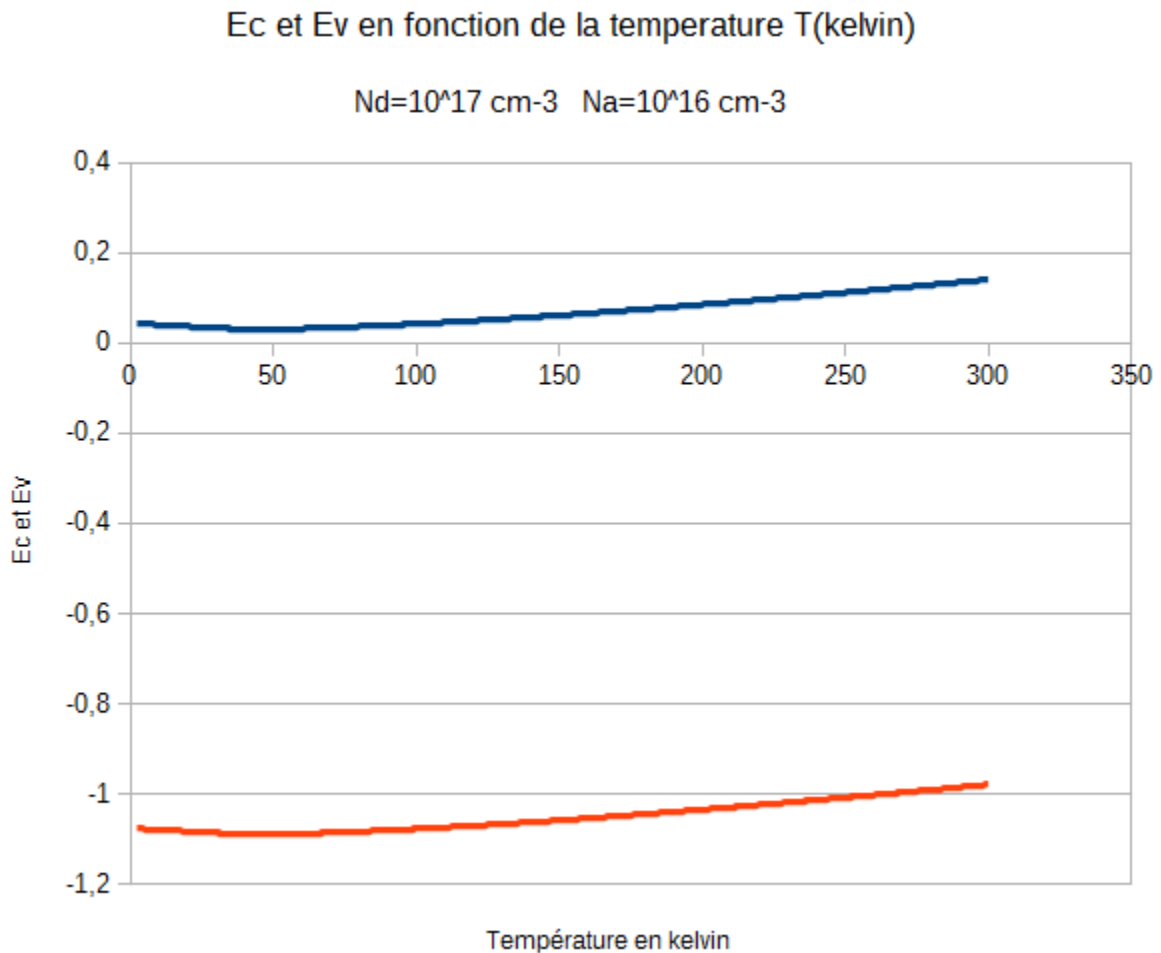


Fig. 5 Aux très basses températures, une partie des électrons restent liés aux donneurs :  $E_c$  se rapproche de  $E_f = 0$  pour  $2 \text{ K} < T < 50 \text{ K}$  lorsque les électrons se libèrent des donneurs par l'activation thermique. Pour  $50 \text{ K} < T < 300 \text{ K}$ , l'activation thermique crée des paires électron-trou qui modèrent le caractère  $N$  du semi-conducteur, remplaçant le niveau de Fermi  $E_f$  vers le centre de la bande interdite entre  $E_v$  et  $E_c$ .

## concentration d'électrons et de trous en fonction de la température

$N_d = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$   $N_a = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$

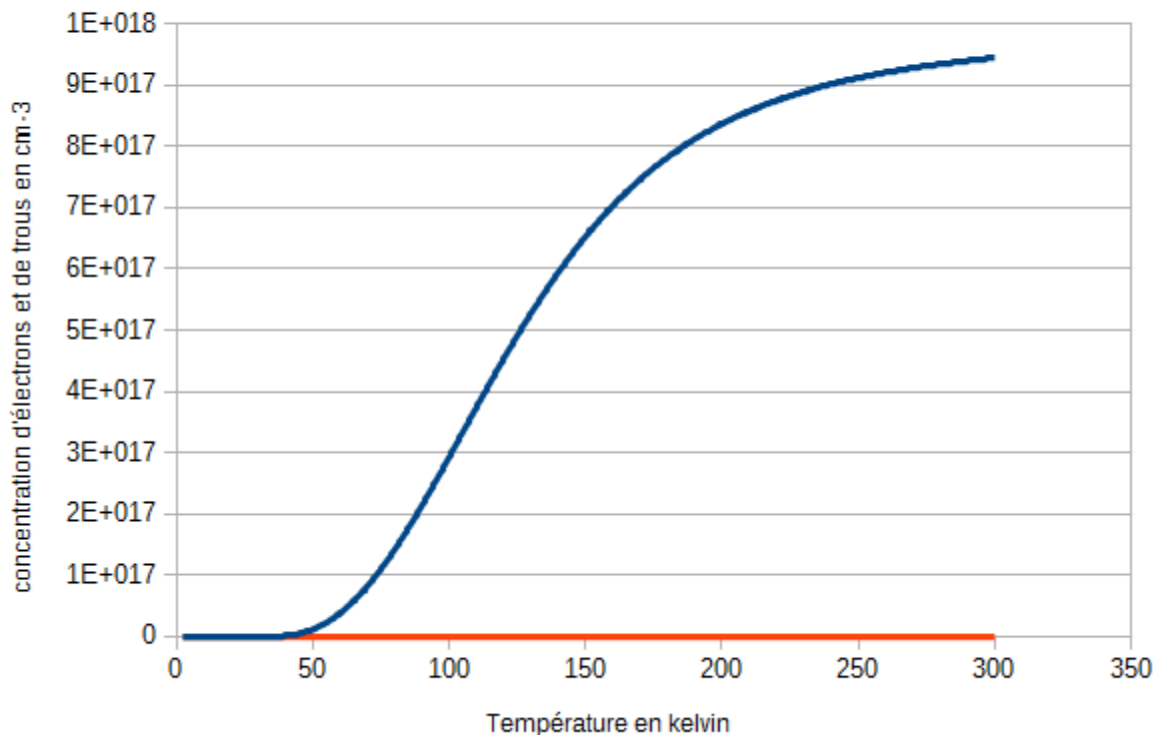


Fig. 6 Aux très basses températures les donneurs et les accepteurs sont faiblement ionisés : il y a peu d'électrons en bleu et peu de trous en rouge. Plus la température augmente, plus les impuretés dopantes s'ionisent. Aux très hautes températures, il se crée en plus des paires électron-trou. L'échelle ne permet pas ici de voir la densité de trous libres très faible.

### Concentration de trous libres

$N_d = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$   $N_a = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$

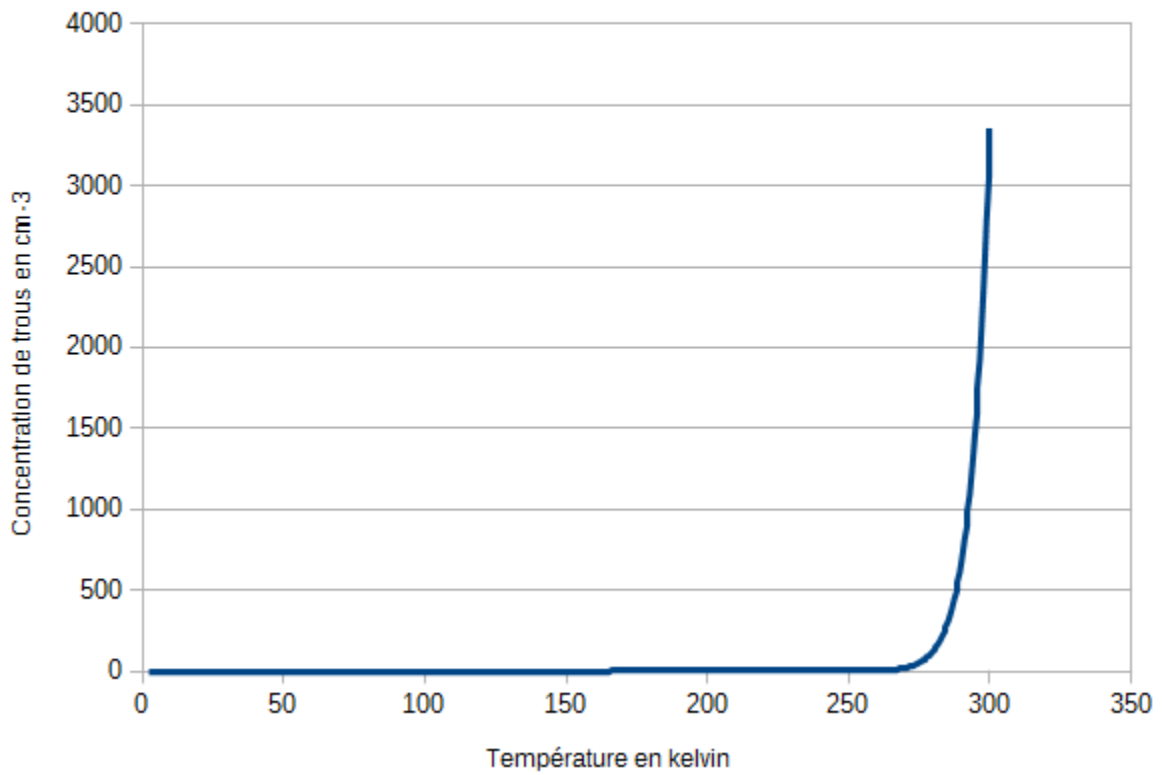


Fig. 7 Concentration de trous libres, principalement créés par l'activation thermique de paires électron-trous dans un matériau globalement de type N. Les trous sont les porteurs minoritaires.



## Fraction de dopants ionisés

$N_d = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$   $N_a = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$

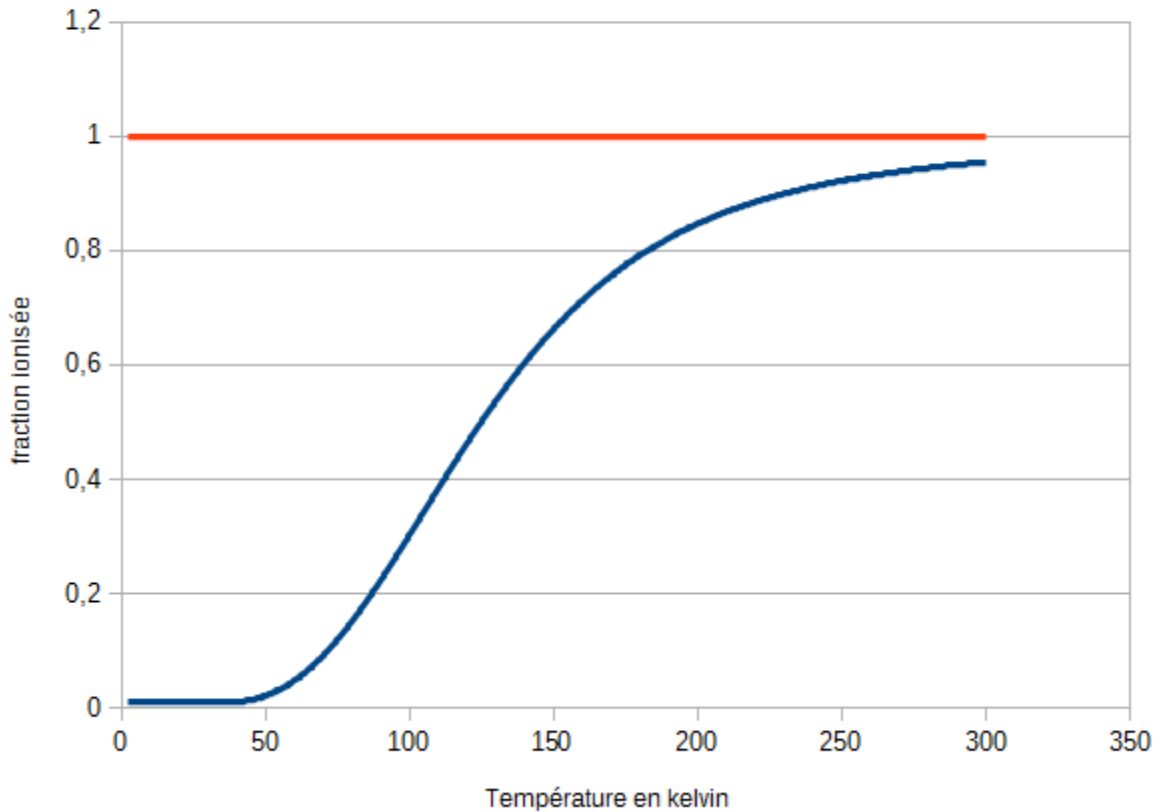


Fig. 8 Fraction de donneurs ionisés en bleu et d'accepteurs ionisés en rouge. Le matériau étant de type N, tous les accepteurs sont ionisés en ayant fixé un électron et le petit nombre de trous créés de cette façon se sont recombinaisonnés avec un petit nombre d'électrons.

7 - "Courbe  $\log_{10}(n(1/T))$ ". Cette courbe comparable à  $n(T)$  permet de voir les effets sur plusieurs ordres de grandeur.

### Concentration d'électrons et de trous

$$N_d = 10^{17} \text{ cm}^{-3} \quad N_a = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$$

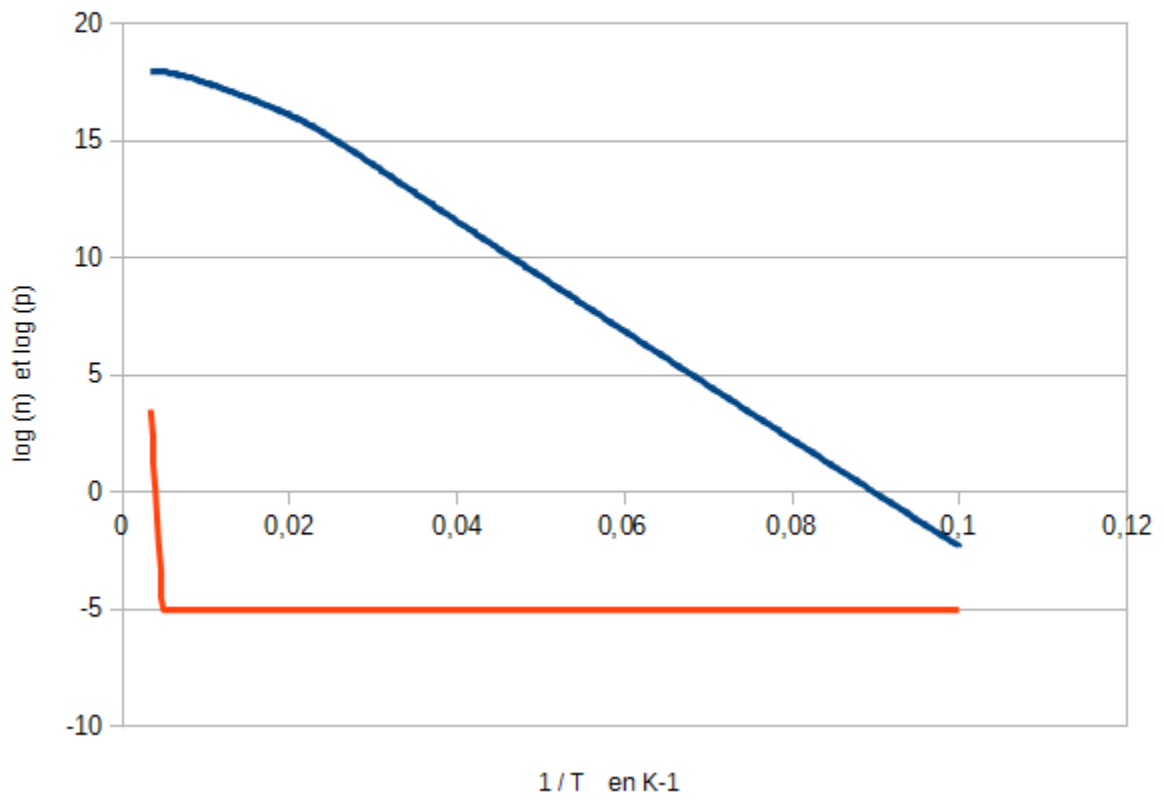


Fig. 9 Cette courbe montre la dépendance en  $\exp(A/T)$  de la densité de porteurs aux basses températures.

n et p entre 2000 K et 300 K ( 1 / T )

$N_d = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$     $N_a = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$

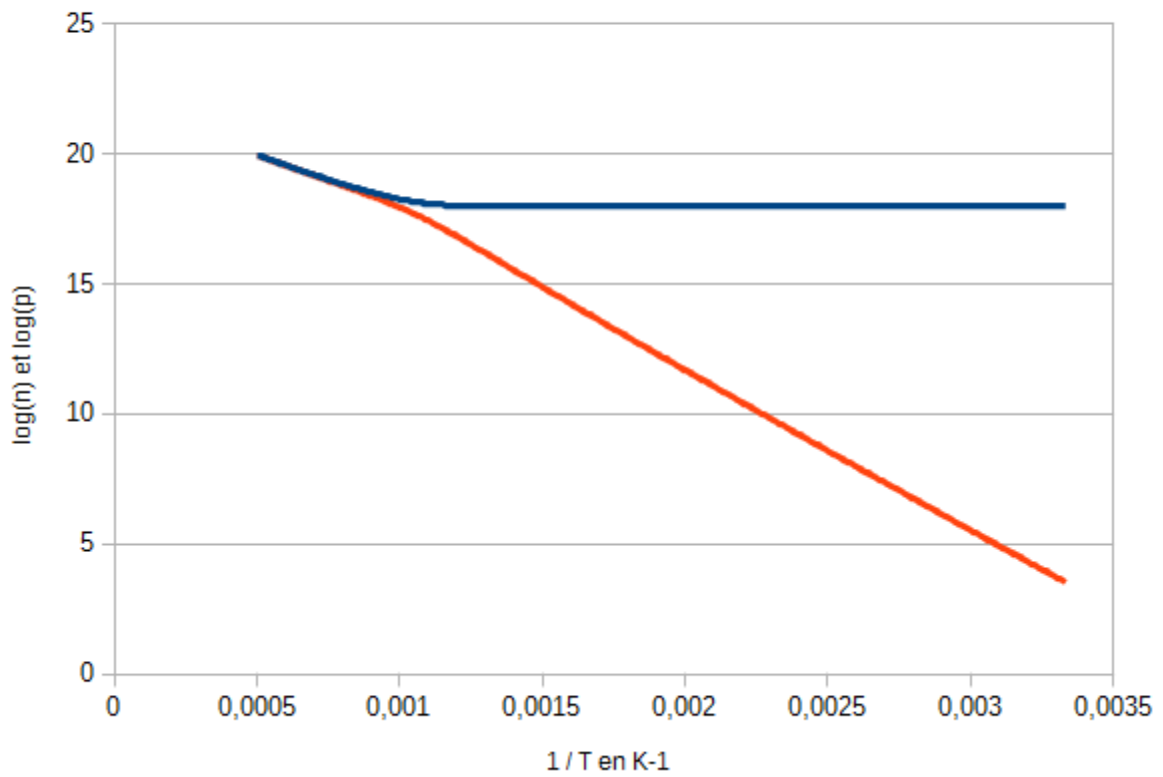


Fig. 10 Concentrations d'électrons en bleu et de trous en rouge aux très hautes températures. Le semi-conducteur perd son caractère N ou P aux températures supérieures à 1000 K

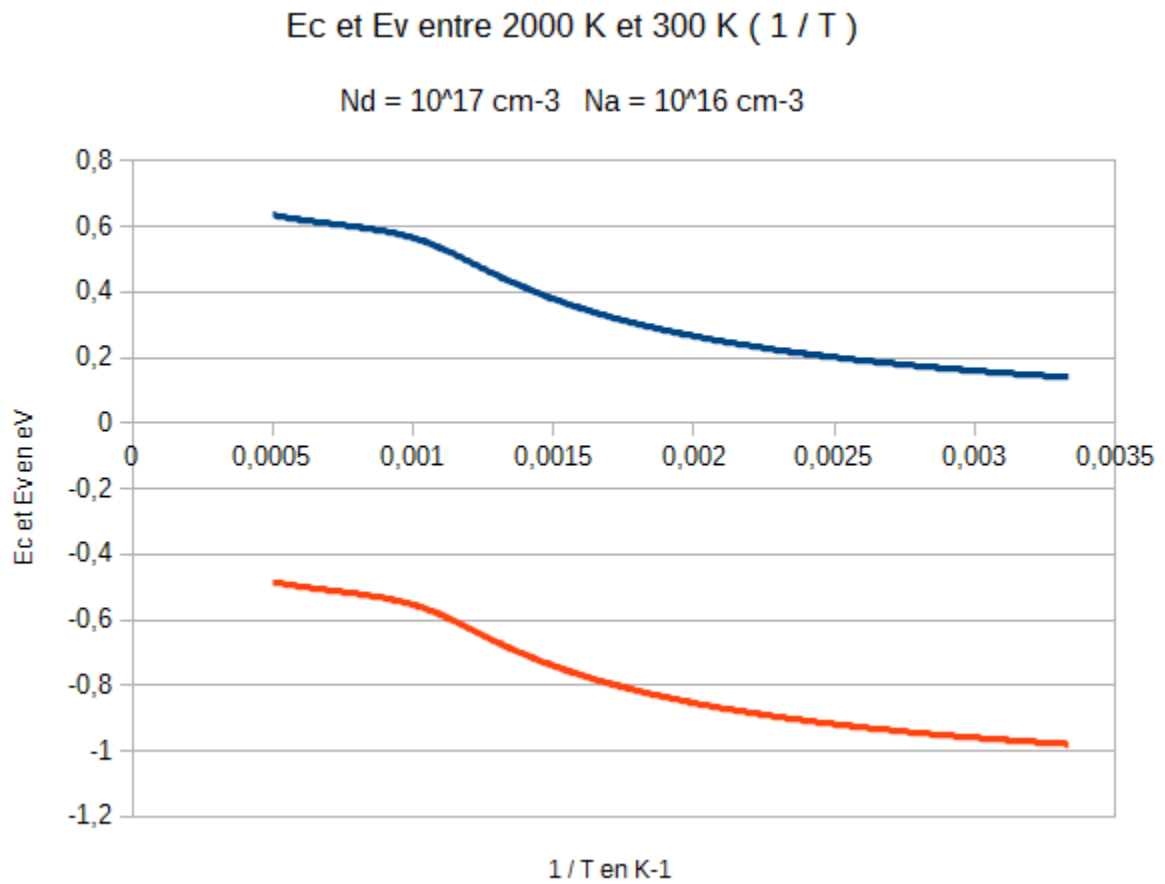


Fig. 11 Niveau de la bande de conduction Ec en bleu et de la bande de valence Ev en rouge aux très hautes températures. Ec et Ev ne dépendent plus des niveaux de dopage pour T > 1000 K.

## Concentrations d'électrons et trous

$N_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$   $N_a = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$

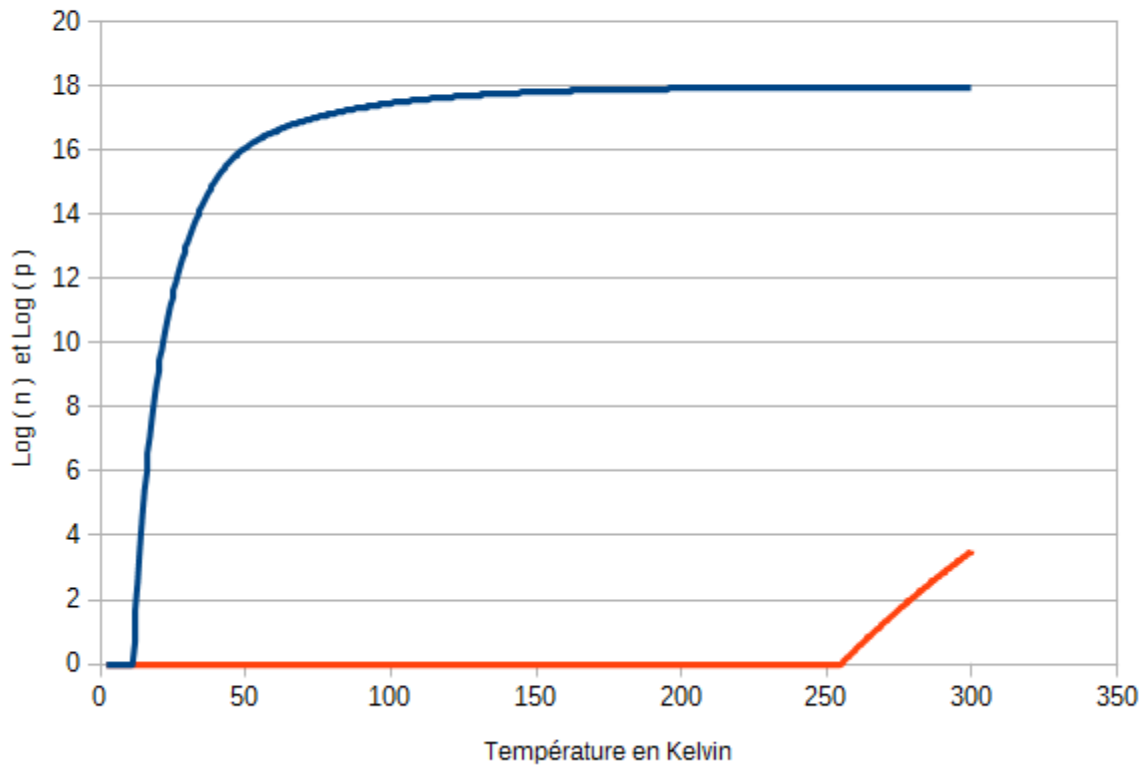


Fig. 12 Logarithme de la densité de porteurs pour  $2 \text{ K} < T < 300 \text{ K}$

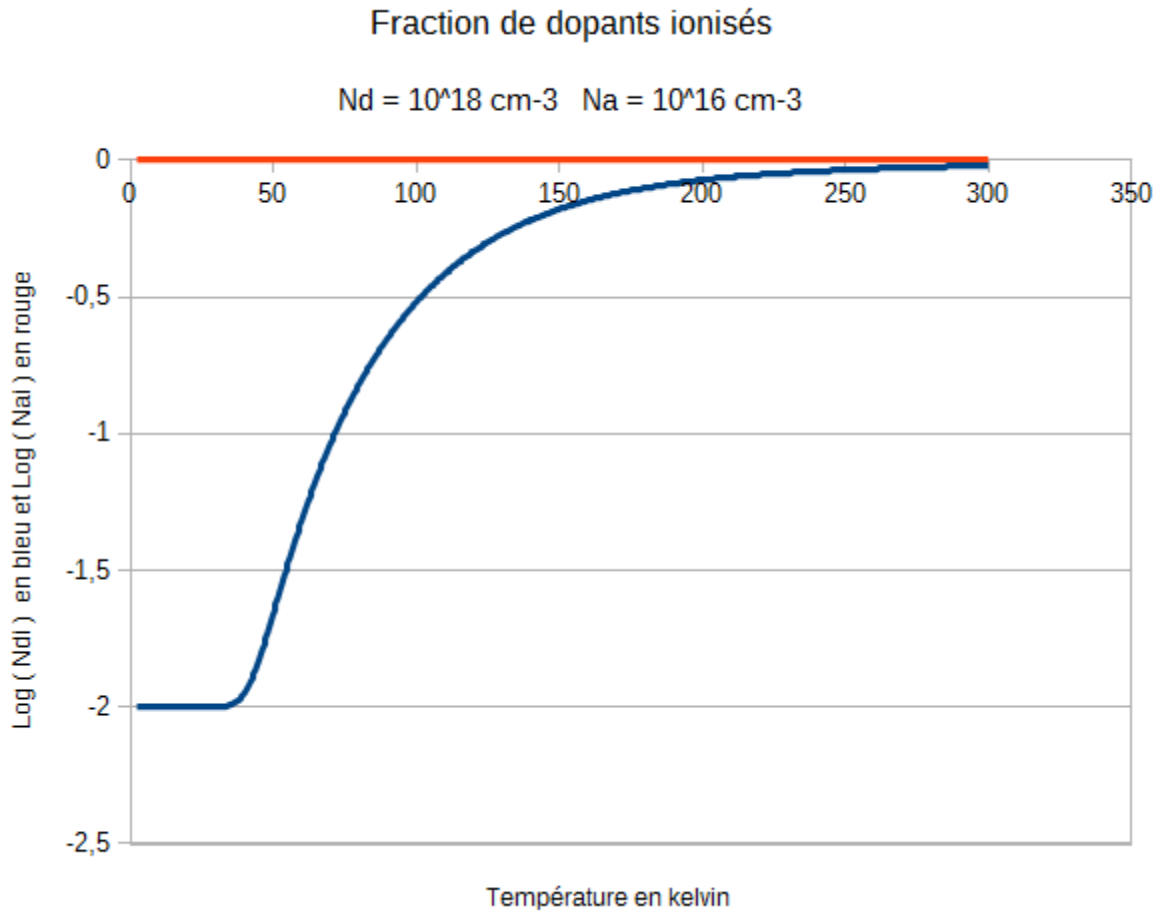


Fig. 13 Pour  $T < 50 \text{ K}$ , la fraction de donneurs ionisés se stabilise à une valeur de  $10^{-2}$ . Les accepteurs sont tous ionisés ( $N_{ai} = 1 = 10^0$ ) dans ce matériau de type N.