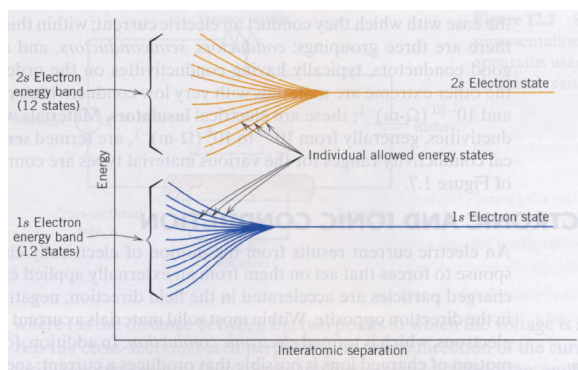


# Formation de bandes dans les matériaux et effets sur les propriétés électriques.

Dans ce chapitre nous allons étudier la formation des bandes électroniques et quel est l'effet de la configuration des bandes sur les propriétés électriques.

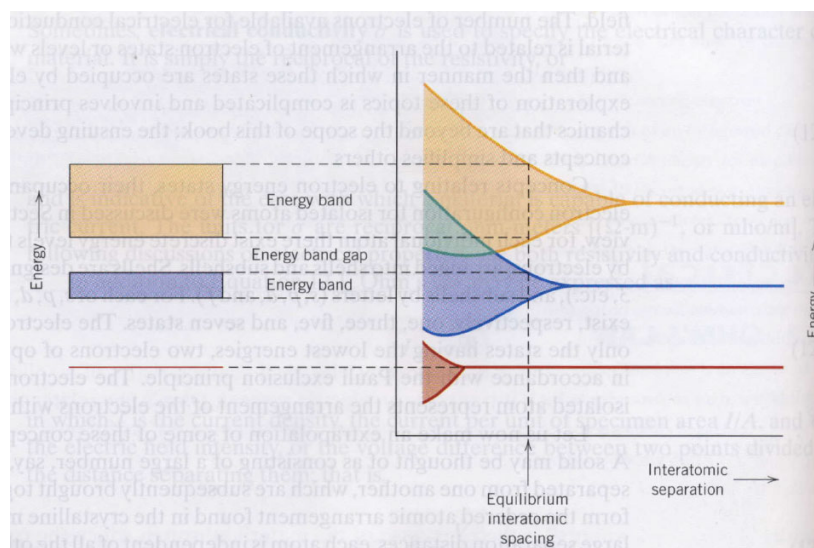
## 1 Formation des bandes électroniques.

Nous avons vu que la valeur de la conductivité dans un matériau est très liée au nombre d'électrons qui peuvent se propager dans le matériau. Il faut voir que tous les électrons d'un atome (et même ceux de valence pour beaucoup de matériaux) ne vont pas être accélérés lorsque l'on applique un champ électrique. Le nombre d'électrons qui peuvent contribuer à la conduction dépend de l'arrangement des états électroniques et de la façon dans laquelle ces états sont occupés par des électrons. Nous allons explorer ceci d'une façon simple.



Les atomes seuls ont une certaine configuration électronique avec des niveaux occupés ou non par les électrons. Les niveaux sont identiques pour des atomes identiques. Lorsque l'on met  $N$  atomes ensemble et qu'on les approche pour former un solide, les électrons de valence des atomes interagissent entre eux et sont perturbés par la présence des électrons des atomes voisins. De plus, en formant un même corps, les électrons

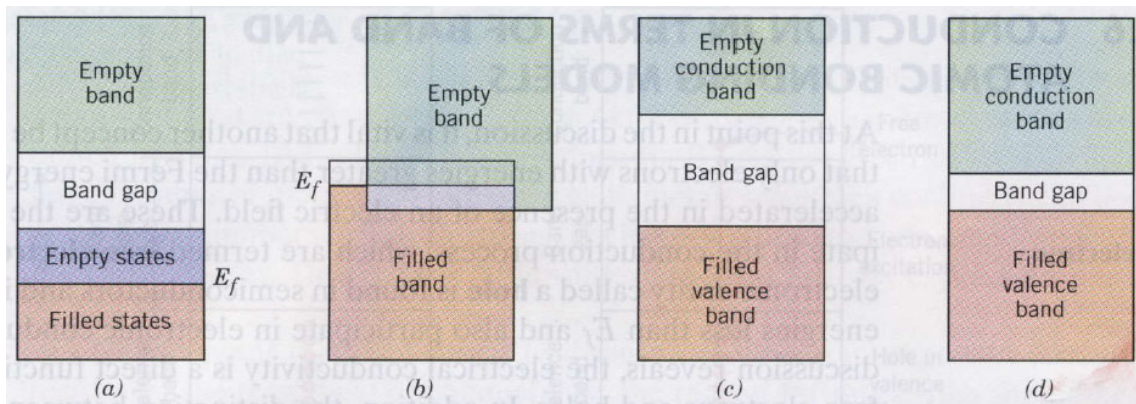
ne peuvent pas occuper les mêmes niveaux, ce qui veut dire que chaque niveau atomique se divise en  $N$  niveaux et forment ainsi une bande électronique, comme schématisé dans la figure ci-dessus.



Les caractéristiques des bandes électroniques dépendent donc de la distance entre les atomes. On observe la formation de « gaps », qui sont l'absence d'états électroniques pour certaines énergies.

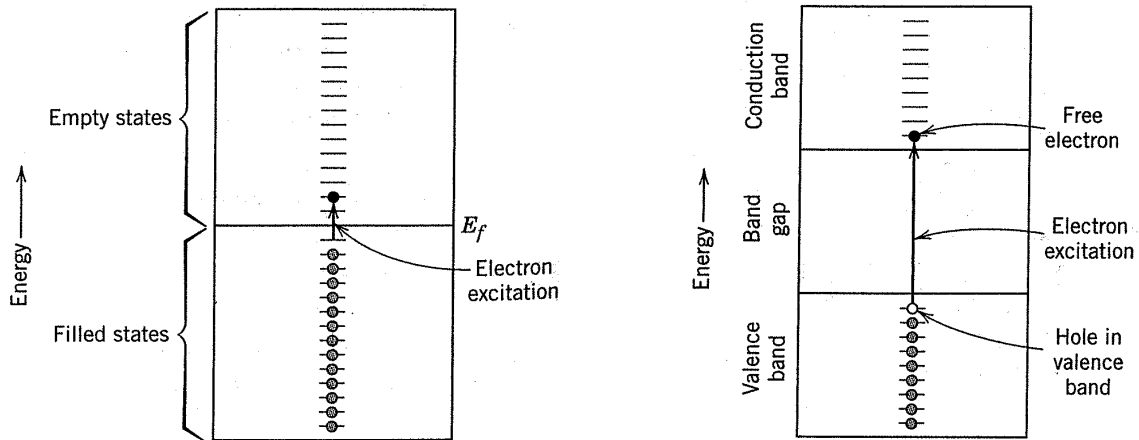
Chaque bande est formée par  $N$  fois la multiplicité des états atomiques. Par exemple, pour les bandes qui proviennent des états  $s$ , nous avons  $N$  états dans la bande. Pour les bandes qui proviennent des états  $p$ , nous en avons  $3N$ .

Les propriétés électriques d'un matériau sont la conséquence de leur structure de bandes et de la présence d'électrons à l'état libre dans les bandes les plus supérieures. Si l'on examine combien de types de bandes électroniques existent à 0K, nous en trouvons 4. Dans la figure on marque l'énergie de Fermi, celle de l'état rempli avec l'énergie la plus élevée:



- (a) Une bande supérieure est vide et l'inférieure est partiellement remplie avec des électrons.). Il s'agit d'un matériau qui conduit bien l'électricité. Cette configuration est typique des métaux avec un électron de valence type  $s$ .  
Exemple : le Cu.
- (b) Nous trouvons un recouvrement entre la bande inférieure et supérieure. Il s'agit d'éléments qui ont des électrons de valence dans des orbitaux  $s$  et  $p$  (d'où vient le recouvrement).  
Exemple : le Mg
- (c) et (d) sont similaires. Une bande (de valence) est complètement remplie et est séparée d'une bande supérieure (dite de conduction). Entre les deux il y a un band gap, caractérisé par l'absence d'états électroniques. Comme les électrons ne peuvent pas gagner ou perdre des quantités d'énergie infinitésimale, il s'agit de matériaux isolants.  
Selon l'amplitude du gap, on parlera d'isolants (grand band gap) ou de semi-conducteurs (plus petit). Le concept reste assez relatif et au cours du temps il y a plusieurs isolants qui sont passés dans la catégorie des semi-conducteurs.  
L'énergie de Fermi est située au milieu du band gap.  
Exemples : quartz, silicium, CdTe, GaN, AlN...

## 2 Conséquences sur la conduction électrique



Nous avons vu dans le cas des métaux que la conduction électrique est faite par des électrons dits libres. Il faudrait rentrer un peu plus en détail sur ce que cela veut dire.

En fait, pour qu'un électron puisse réagir au champ électrique, il faut qu'il puisse gagner de l'énergie de façon infinitésimal. Ceci est seulement possible quand des états vides sont proche des niveaux occupés par un écart en énergie  $\Delta E \sim 0$ , comme le montre la figure ci-dessus à gauche. Ce mécanisme de conduction électrique est possible dans les matériaux de type (a) et (b).

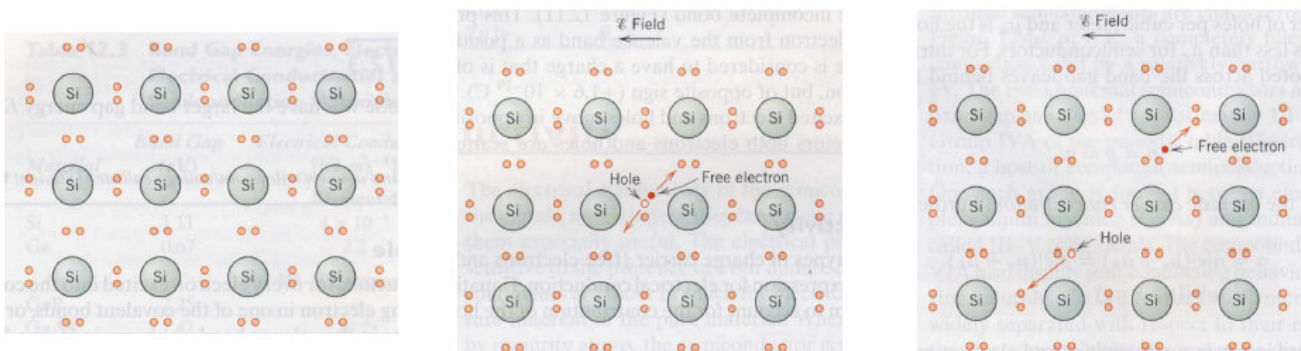
Pour les matériaux de type (c) et (d), il n'y a pas d'états vides adjacents aux états occupés de la bande de valence. Afin qu'un électron puisse réagir au champ électrique, il doit être promu à la bande de conduction en absorbant l'énergie nécessaire. Dans la bande de conduction, il y a plein d'états adjacents vides et les électrons peuvent être accélérés. Ils peuvent être promus dans la bande de conduction par :

- (i) excitation thermique
- (ii) illumination avec une énergie supérieure au band gap
- (iii) par dopage

## 3 Concepts uniques des semi-conducteurs et isolants.

### → Concept de trou

Lorsque un électron part de la bande de valence à celle de conduction, il laisse une charge positive derrière, qui est en fait l'atome ionisé qui a perdu l'électron.



Cette charge positive peut aussi se déplacer dans le matériau (en fait il s'agit des électrons qui se déplacent d'un atome à un ion positif). Ceci veut dire que le courant électrique est la somme du déplacement des électrons et des trous

$$\sigma = ne\mu_e + pe\mu_h$$

Avec  $n$  et  $p$  étant les concentrations d'électrons et trous respectivement, et  $\mu_e$  et  $\mu_h$  leur mobilité respective. Dans un semi-conducteur intrinsèque, on trouve la même densité d'électrons que de trous et donc :

$$\sigma = ne(\mu_e + \mu_h)$$

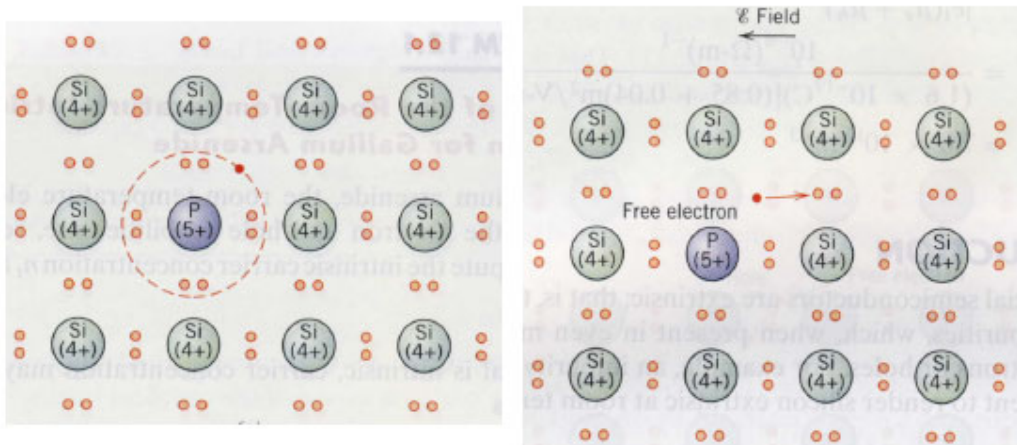
### → Concept de dopage

Il est possible de changer la conductivité d'un semi-conducteur ou isolant en introduisant une quantité extrêmement faible d'impuretés. Ce procédé s'appelle dopage. Pour comprendre ce procédé de manière simple on prend l'exemple du silicium. Le Si a 4 électrons de valence. Chaque électron forme une liaison avec un atome voisin. Nous savons donc que chaque atome forme 4 liaisons.

#### Dopage type n.

Lorsque nous introduisons un atome ayant 5 électrons de valence dans le silicium (ex. P), l'impureté va s'incorporer de manière substitutionnelle. Ceci veut dire que cet atome formera 4 liaisons avec les 4 Si voisins. Il lui restera donc un électron qui ne pourra pas participer à une liaison. Cet électron reste faiblement lié à l'impureté et donc peut devenir libre dans le matériau de façon très facile.

Ce genre d'impuretés s'appelle **donateur**, et le dopage est de type n.

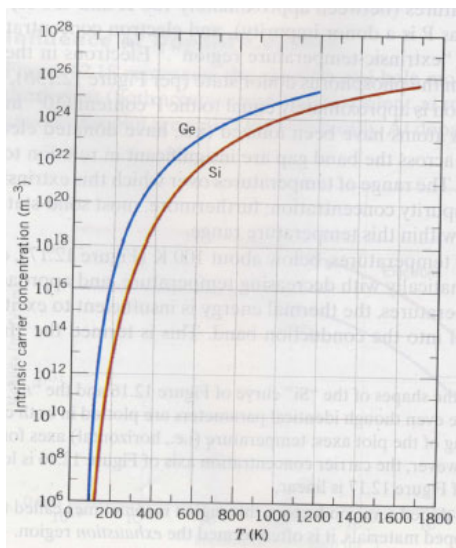
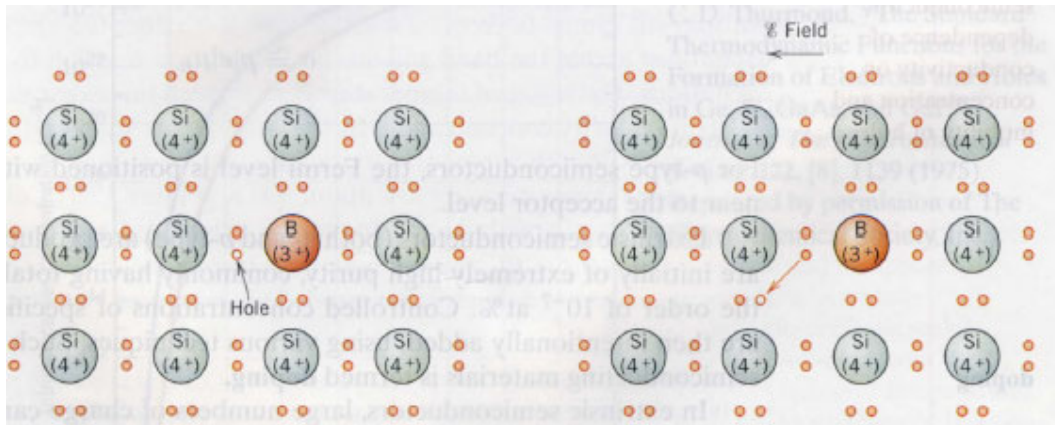


#### Dopage type p.

Lorsque nous introduisons un atome avec 3 électrons de valence dans le silicium (ex. B), l'impureté va aussi s'incorporer de manière substitutionnelle. Cela implique que cet atome formera 4 liaisons avec les 4 Si voisins. Pour faire cette liaison, l'impureté devra emprunter un électron à un Si voisin. Ceci génère la création d'un trou libre.



Ce genre d'impureté s'appelle **accepteur**, et le dopage type p.



### Dépendance en température de la densité de porteurs.

Pour les semi-conducteurs intrinsèques (qui n'ont pas subi de dopage), la concentration d'électrons dépend exponentiellement de la température. Dans ce cas l'énergie d'activation est la moitié du gap :

$$n_i \propto \exp\left(\frac{-E_g}{2KT}\right)$$

Ceci explique que la densité d'électrons dans le germanium ( $E_g=0.7$  eV) est plus élevée que pour le silicium ( $E_g=1.1$  eV). ( $E_g$  étant l'énergie de gap)

Lorsque le matériau est dopé, il existe un régime de températures (qui s'appelle extrinsèque) dans lequel la quantité de porteurs de charge est donnée exclusivement par la concentration des dopants.

