

Le modèle des bandes expliqué simplement

notion hors programme mais indispensable en ADS

Bande d'énergie

Vous connaissez les niveaux d'énergie dans les atomes. Plaçons nous maintenant à l'état solide , et décrivons un ensemble d'atomes formant soit un cristal métallique (Fe par exemple) , soit un cristal ionique (tel NaCl) ou soit un cristal covalent tel le carbone de type diamant.

Dans ce cas , les niveaux d'énergie se transforment en **bande d'énergie**. c'est à dire qu'il y a des domaines de valeurs d'énergies autorisées (les bandes) séparées par des domaines d'énergies interdites (bandes interdites).

Soit N le nombre d'atomes présents dans le solide monocristallin. Chaque bande peut recevoir un nombre donné d'électrons (2N , 4N , 6N par exemple). Un électron est décrit par un scalaire (l'énergie) et un vecteur (quantité de mouvement). Chaque bande propose un même nombre de « places » en énergie et en vecteur . La somme des quantités de mouvement possibles dans chaque bande est nulle par symétrie. (*il y a parfois un lien entre la symétrie du cristal et le champ électrique global : effet piézo-électrique*)

Ceci a pour conséquence qu'une bande entièrement occupée (pleine) ne peut pas participer à la conduction électrique , la quantité de mouvement totale des électrons étant nulle, quelque soit le champ électrique imposé.

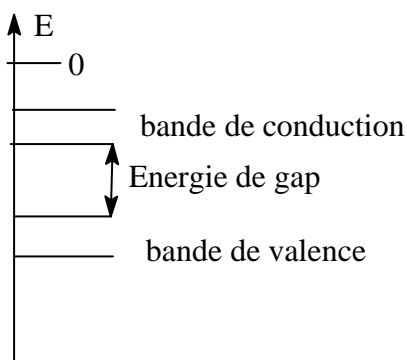
On appelle **bande de valence** la dernière bande entièrement occupée et **bande de conduction** la bande immédiatement supérieure.

On peut alors avoir deux situations :

1. la bande de conduction est partiellement remplie, on obtient alors un conducteur (métaux)
2. la bande de conduction est vide , on obtient alors un isolant (cas des cristaux ioniques).

En effet , si une bande partiellement remplie a une quantité de mouvement électronique nulle en absence de champ électrique, elle peut devenir non nulle si le champ rompt la symétrie en ajoutant un terme de type $q \cdot \text{vecteur } E$. Il y a alors conduction.

On appelle gap la différence d'énergie entre la bande de conduction et celle de valence. Le gap se mesure en électron volt. (eV) . Les valeurs courantes vont de 0.7 eV pour le germanium à 4eV pour le carbone diamant (le meilleur des isolants).



Semi-conducteurs

Le silicium présente un schéma de type isolant avec un gap de 1eV . A 300 K , l'énergie d'agitation thermique est de l'ordre de kT et vaut 0.026 eV . La statistique de Boltzman montre que le rapport des populations de deux niveaux distants de E en énergie est $\exp(-E/(kT))$. Ceci donne $2 \cdot 10^{-17}$ pour $E = 1\text{eV}$.

Ainsi , malgré la présence d'un gap de 1 eV, on trouve quelques électrons en bande de conduction dans le silicium ultra pur et quelques **trous** (absences d'électrons), en bande de valence. Il y a donc des paires dites « **électron/trou** ».

Comme les trous sont peu nombreux, il est plus commode de décrire les propriétés de la bande de valence en la considérant comme absolument pleine en électrons mais possédant quelques trous de charge +e et un peu moins mobiles que les électrons en bande de conduction . D'où l'abus de langage classique qui parle de « **trous positifs** » .

Une élévation de température provoque un accroissement du nombre de paire électrons/trous présentes, donc une augmentation de la conductivité du matériau. On parle alors de **semi-conduction intrinsèque**.

C'est un phénomène inévitable pour les corps comme le silicium et le germanium. La conduction obtenue est très faible (environ 10^{-17} fois celle du cuivre pour Si) . Si le silicium est pollué volontairement par des éléments de la colonne précédente (Al par exemple) , le cristal formé possède alors des lacunes dans la bande de valence et donc un excès de trous par rapport aux électrons de la bande de conduction. On parle de dopage de **type p** (pour positif) . Le dopant est en concentration de l'ordre du ppb (partie par milliard, billion en anglais) .

Si le dopant est un élément de la colonne suivante (P ou As par exemple) il y a un apport d'électrons en bande de conduction. On parle alors de dopage de **type n** (pour négatif) .

Une jonction np forme une diode et npn ou pnp un transistor. Pour cela on opère par diffusion contrôlée de dopants n ou p dans une matrice de silicium monocristalline , à l'aide de masques qui interdisent la diffusions dans certaines zones (genre de pochoirs) . On opère maintenant couramment en multicouches (une couche de silicium dopé, une couche d'oxyde de silicium comme isolant, une nlle couche de silicium dopé...(le mini mac de la semi-conduction).

Niveau de Fermi (d'après Wikipédia)

Le niveau de Fermi est une caractéristique propre à un système qui traduit la répartition des électrons dans ce système en fonction de la température. Concrètement le niveau de Fermi est une fonction de la température mais il peut être considéré, en première approximation, comme une constante. Laquelle équivaldrait alors au niveau de plus haute énergie occupé par les électrons du système à la température de 0 K.

- A $T = 0$ K, la statistique d'occupation des électrons est en marche d'escalier, les niveaux d'énergie inférieurs à celui de Fermi sont tous occupés, et aucun au-dessus.
- A toutes les autres températures, la répartition des électrons a une symétrie par rapport au niveau de Fermi, en ce sens que la somme des probabilités d'occupation de deux niveaux d'énergies symétriques par rapport au niveau de Fermi est unité. Et la probabilité d'occupation du niveau de Fermi par les électrons est 1/2.

Conséquences à T quelconque:

- Dans un conducteur, le niveau de fermi est situé dans la bande de conduction.
- Dans un isolant ou un semi-conducteur, il est situé au milieu de la bande interdite
- Dans un semi-conducteur dopé p, il est situé en haut de la bande de valence
- Dans un semi-conducteur dopé n, il est situé en bas de la bande de conduction.

Lors du contact équipotentiel entre deux matériaux , leurs niveaux de Fermi s'égalisent.

Photopile , effet photovoltaïque.

Une absorption de photon d'énergie $h\nu$ supérieure ou égale à l'énergie de gap peut entraîner la création d'une paire électron/trou. Soit cette paire se recombine rapidement avec émission d'un photon d'énergie de gap soit les porteurs de charge circulent et tout se passe comme si l'électron et le trou se recombinaient via un circuit électrique. Il y a alors création d'une photopile.

Les photons visibles ont une énergie comprise entre 1.5 et 3 eV .

Les photopiles à base de silicium sont donc actives dès le proche infra-rouge, d'autres à base de dioxyde de titane (gap de 3.2 eV) ne fonctionnent que dans le très proche UV.