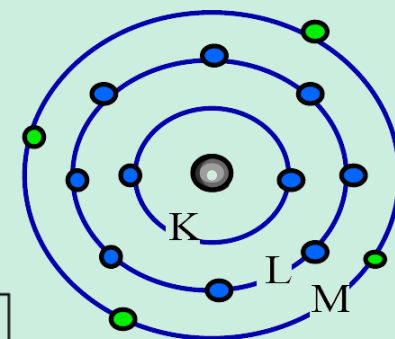


# C. Les électrons dans les molécules & les cristaux

## 1. Rappel : structure électronique de l'atome isolé

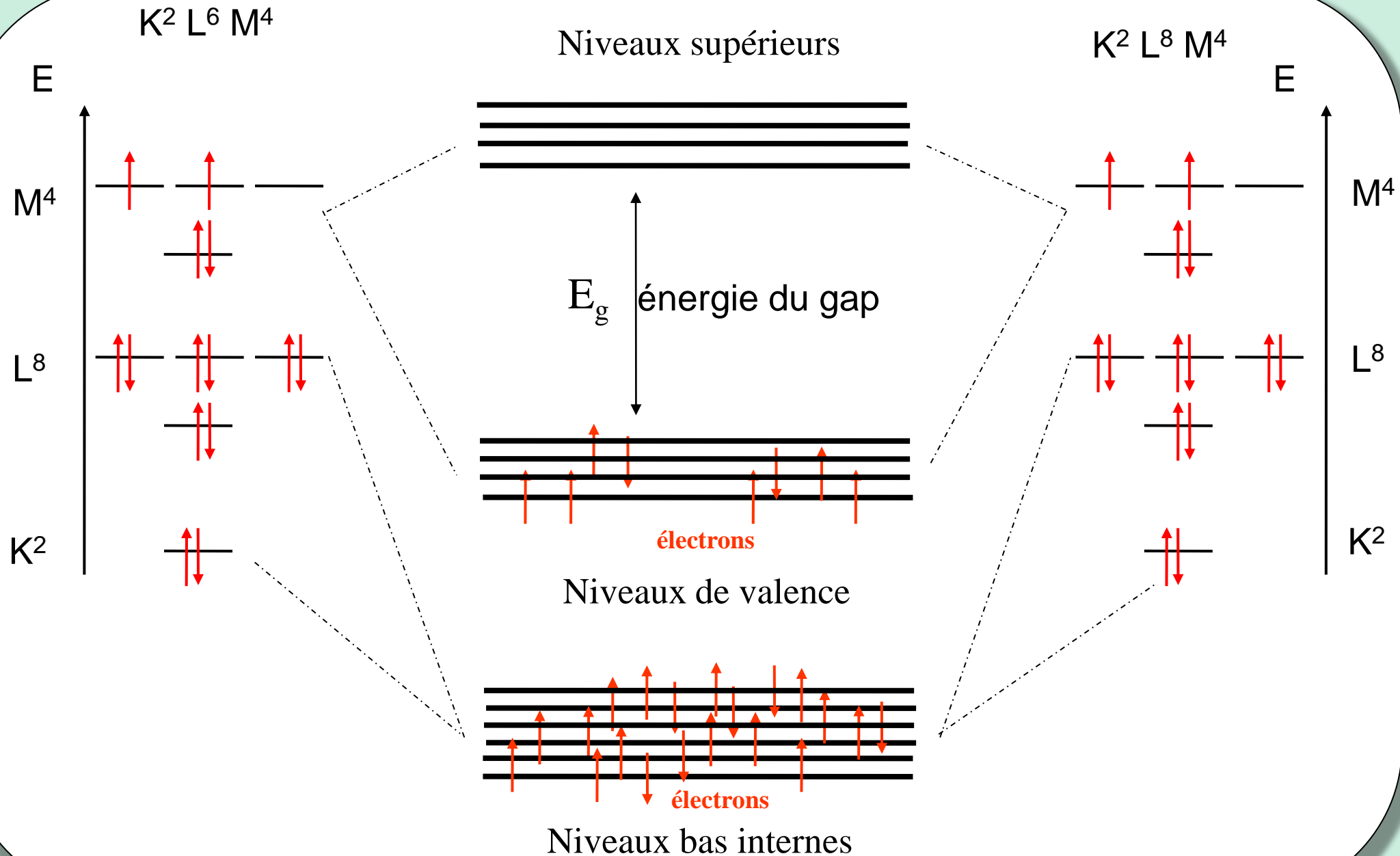
Prenons le silicium Si : Structure :  $K^2 L^8 M^4$



Atome de silicium

Bloc <i>s</i>												Bloc <i>p</i>					
1	2											13	14	15	16	17	18
1																	2
H																	He
3	4	Bloc <i>d</i>										5	6	7	8	9	10
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
11	12	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
87	88	89	104	105	106												
Fr	Ra	Ac	Unq	Unp	Unh												

### 3. Diagramme énergétique de 2 atomes de silicium : cas de $\text{Si}_2$



Pour la suite, on « oubliera » les niveaux internes, rarement utiles

#### 4. Diagramme énergétique de N atomes de silicium : le cristal

Systeme de N orbitales qui se recouvrent  
Si N grand, les niveaux deviennent indiscernables

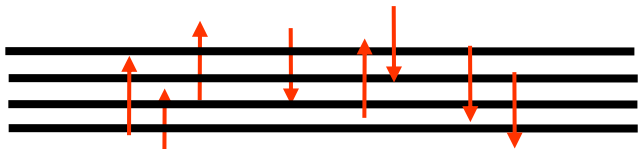


Formation de bandes

Niveaux supérieurs = Conduction



$E_g$



électrons

Niveaux bas = Valence

avec N grand



Conduction

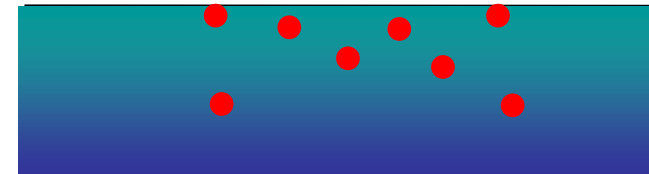


$E_c$

$E_g$

gap

$E_v$



Valence



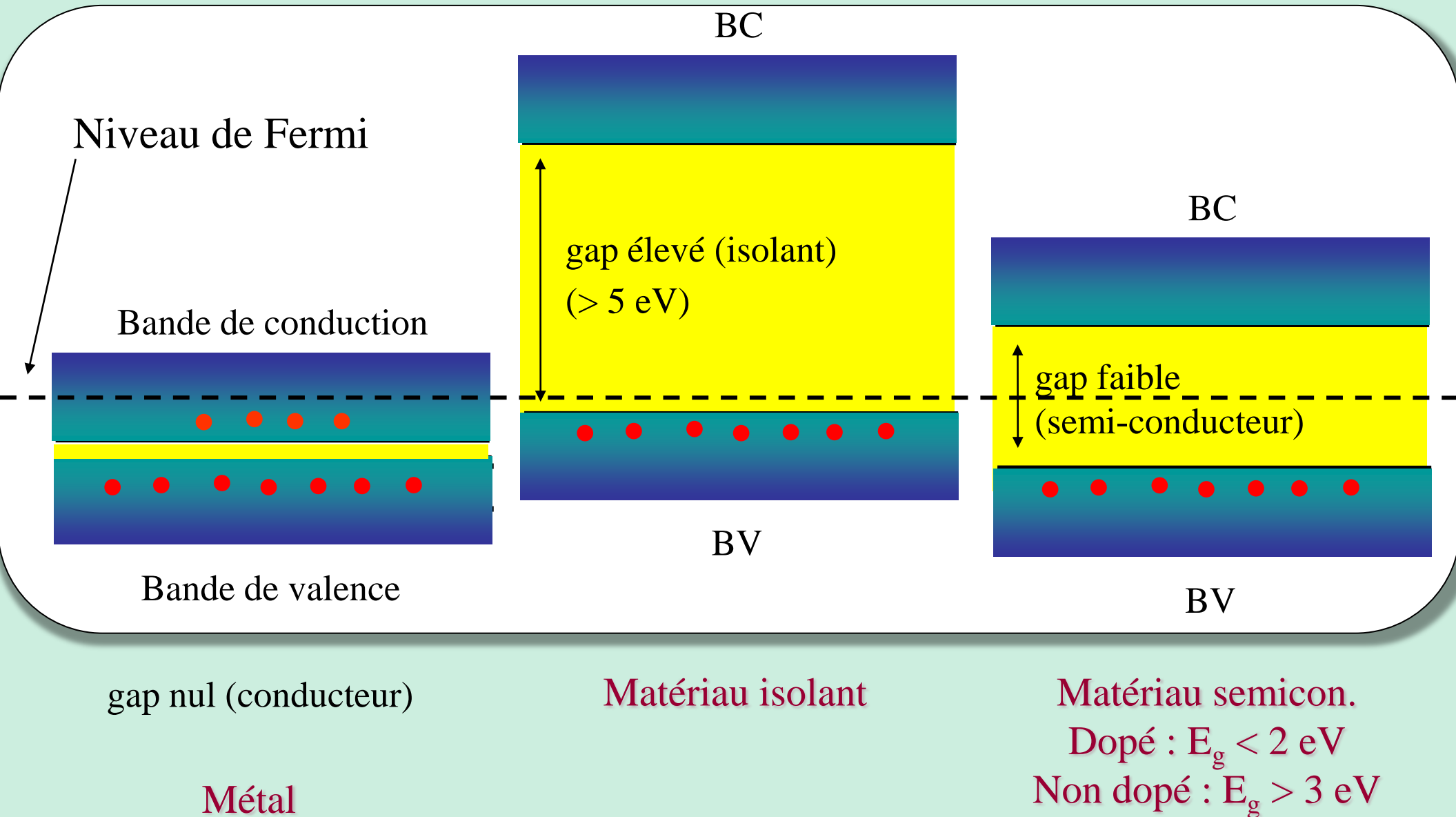
On a vu que le Si contient  $5 \cdot 10^{22}$  atomes. $\text{cm}^{-3}$  (cristallo).

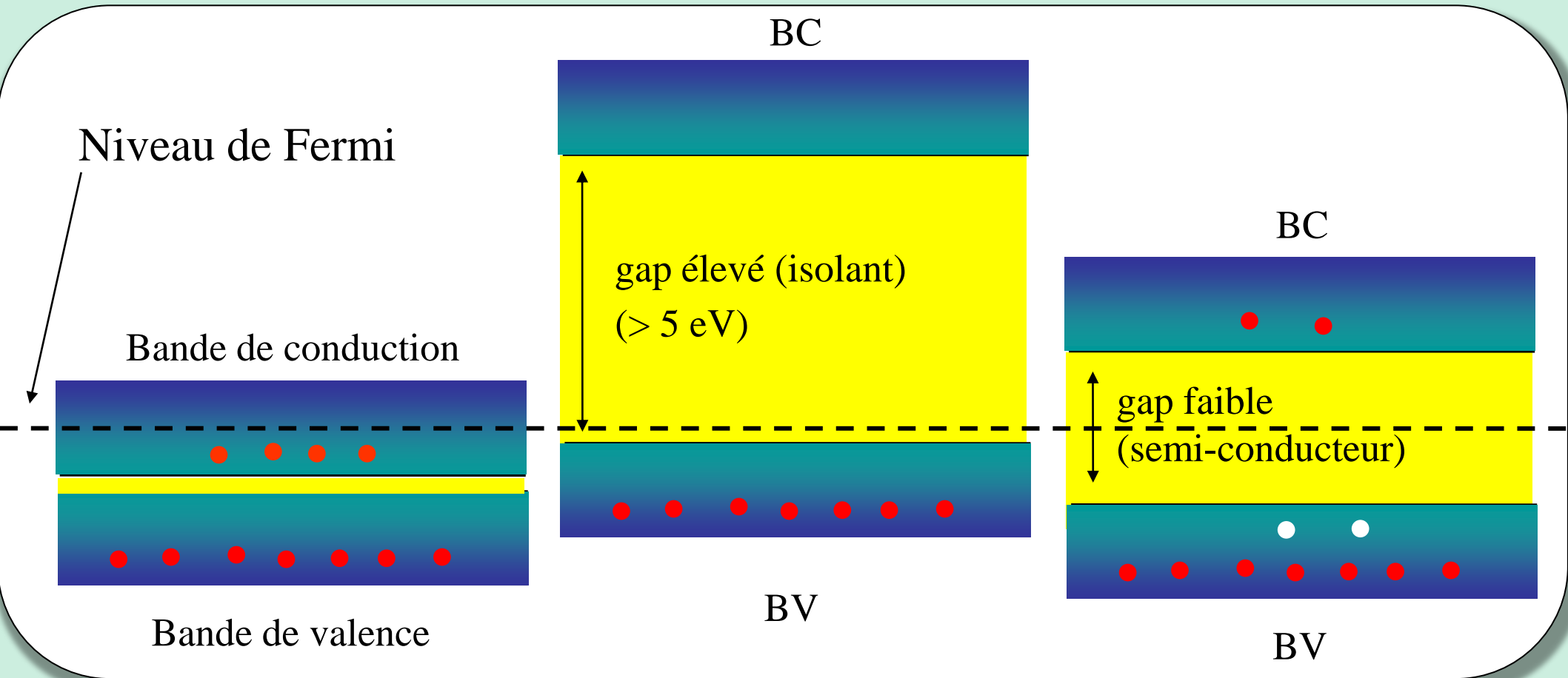
Si on suppose qu'il y a env. 5 niveaux par atome et si la largeur de la bande fait 5 eV, cela fait  $5 / 5 \cdot 10^{23} = 10^{-23}$  eV d'écart : **impossible à séparer !**

## 5. Gap dans les matériaux : conducteur, isolant, semiconducteur

### a. Les différents matériaux

Chaque matériau cristallin possède une caractéristique propre :  
**le niveau de Fermi**. C'est **l'énergie max. des électrons à 0 K**





gap nul (conducteur)  
**Métal**

**Matériau isolant**

**Matériau semicon.**  
Dopé :  $E < 2 \text{ eV}$   
Non dopé :  $E > 3 \text{ eV}$

Cas métal : tjrs conducteur (électrons dans la BC)

Cas isolant :  $\text{gap} > 5 \text{ eV}$ .

On considère qu'il faut un  $\text{gap} > 200 kT_{\text{ambiante}}$  pour bloquer

Exemples : diamant,  $E_g = 5,47 \text{ eV}$  ;  $\text{SiO}_2$ ,  $E_g = 9 \text{ eV}$   
Si,  $E_g = 1,12 \text{ eV}$  ; Ge,  $E_g = 0,66 \text{ eV}$

## Petit rappel sur les ordres de grandeurs

Les gap des métaux : 0 eV  
semicons : < 3 eV  
isolants : > 5 eV

• Energie thermique

$$E = \frac{1}{2} kT$$

$$kT_{\text{ambiante}} = 1,38 \cdot 10^{-23} \times 298 = 4,1 \cdot 10^{-21} \text{ J} = 0,026 \text{ eV}$$

• Energie radiative

$$E = h\nu = hc / \lambda$$

$$h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J.s} \longrightarrow \nu = 418 \cdot 10^{14} \text{ Hertz, soit } 620 \text{ nm pour } E = 2 \text{ eV}$$

