THÉORIE DES BANDES ET DYNAMIQUE DES ÉLECTRONS

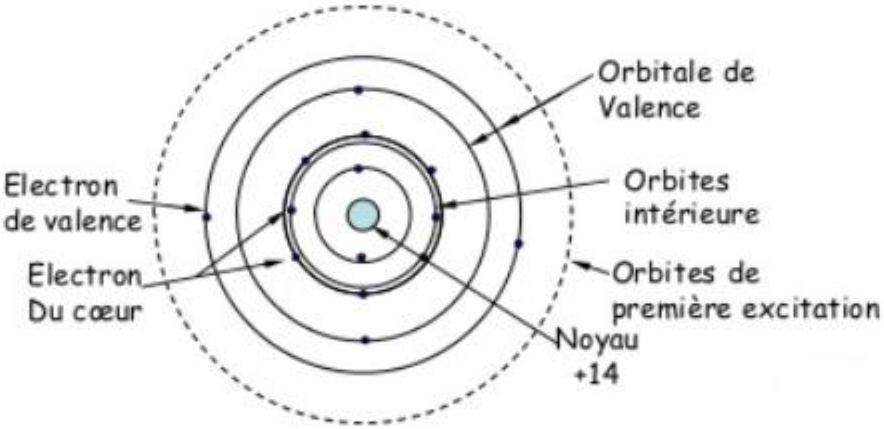
Chapitre 2

Structure électronique de la matière

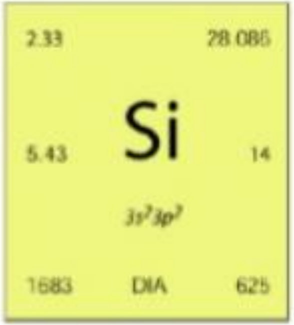
Cas d'un atome isolé

L'atome est constitué d'un noyau autour duquel gravitent des électrons de charge négative. Les électrons d'un atome isolé prennent des valeurs d'énergies discrètes et chaque niveau d'énergies peut accueillir un nombre limité d'électrons

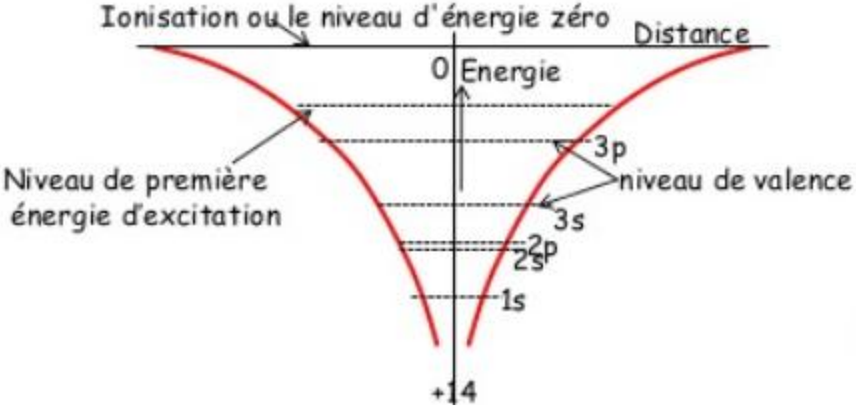
L'atome



Orbitale de Valence
Electron de valence
Orbites intérieure
Electron Du cœur
Orbites de première excitation
Noyau +14



2.33
28 085
Si
5.43
14
$3s^2 3p^2$
1683
DIA
625



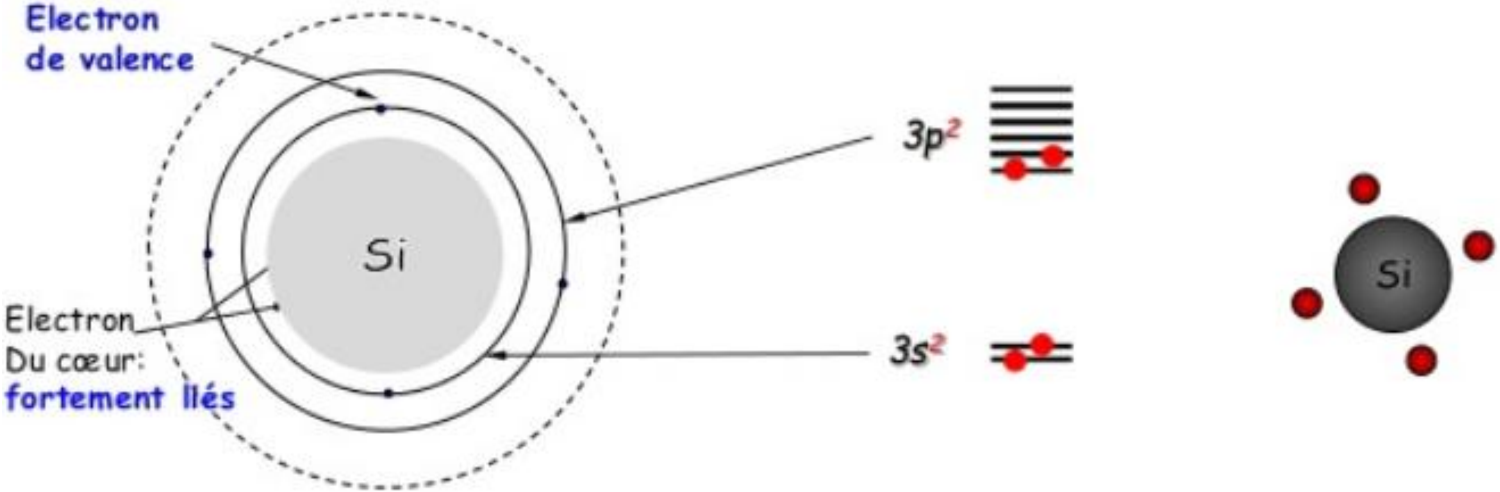
Ionisation ou le niveau d'énergie zéro
Distance
0
Energie
3p
niveau de valence
Niveau de première énergie d'excitation
3s
2p
2s
1s
+14

❑ Mécanique quantique pour un atome isolé :

Niveaux d'énergie discrets

Modèle qualitatif pour le *Silicium*:

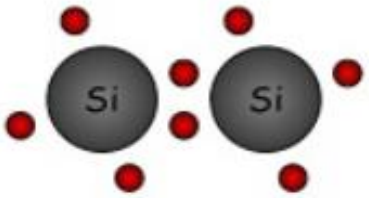
Structure électronique (14 électrons): $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^2$

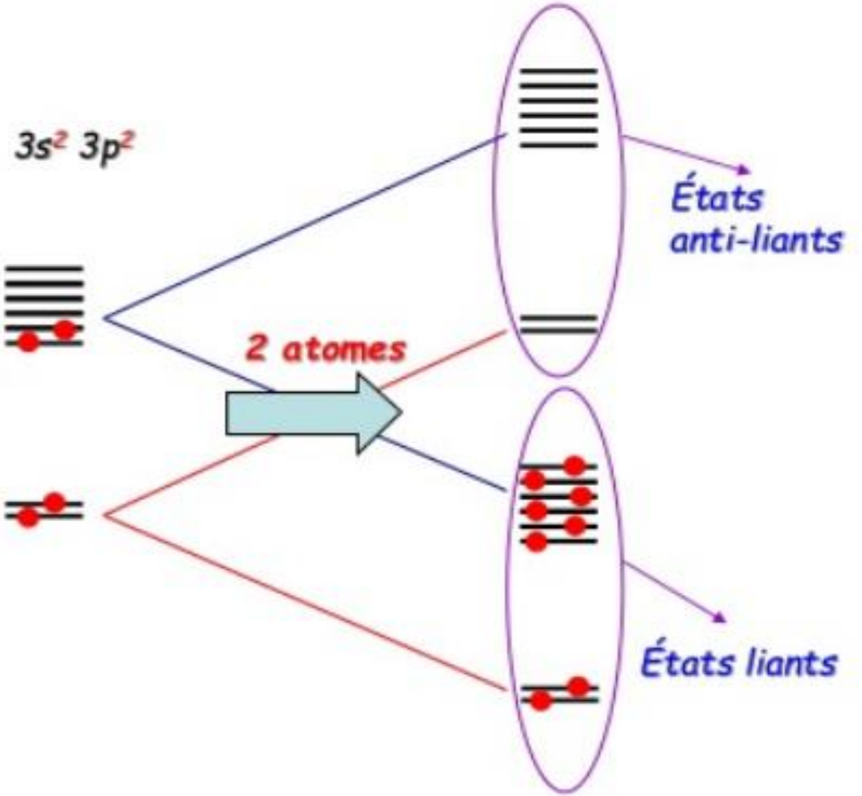


Cas d’un atome liés, bandes d’énérgies

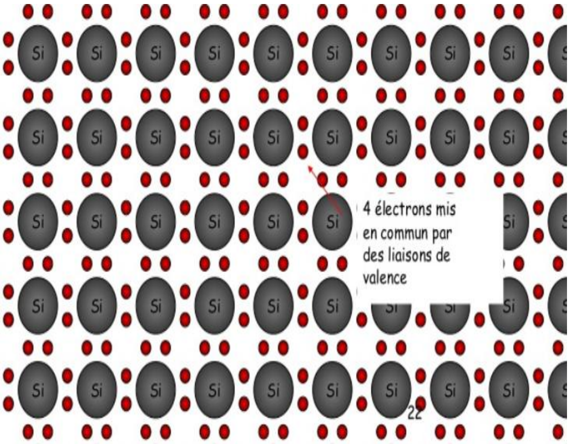
❑ Si on approche 2 atomes :

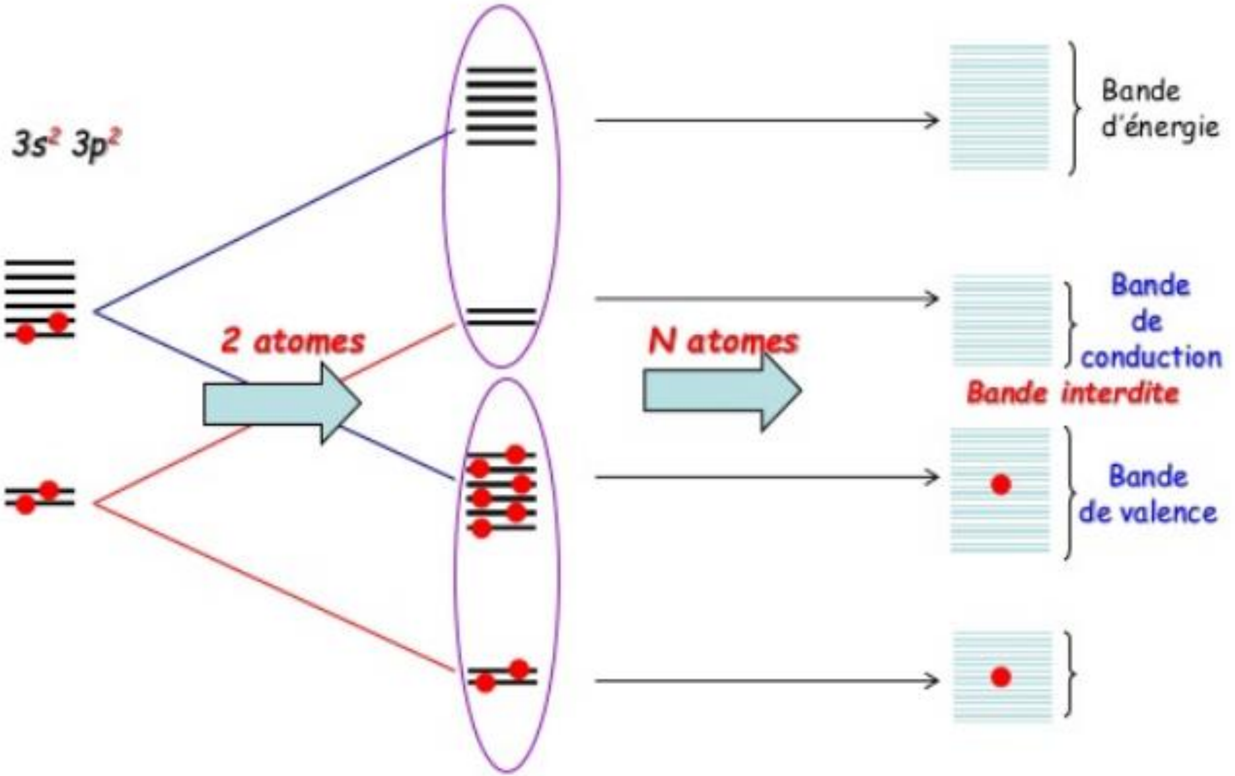
-Fonctions d’ondes des électrons perturbées
-Deux fois plus d’électrons sur le même niveaux
-Chaque niveau → 2 niveaux

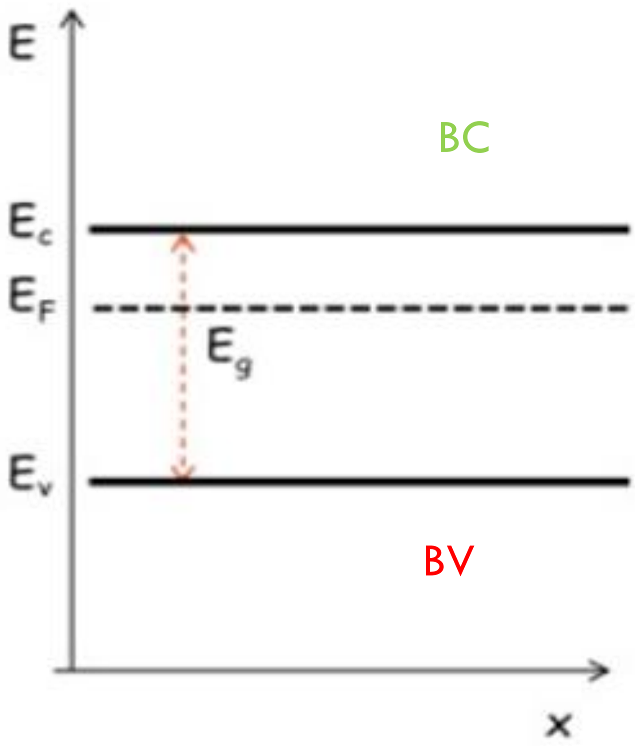




❑ **Si on approche N atomes?**



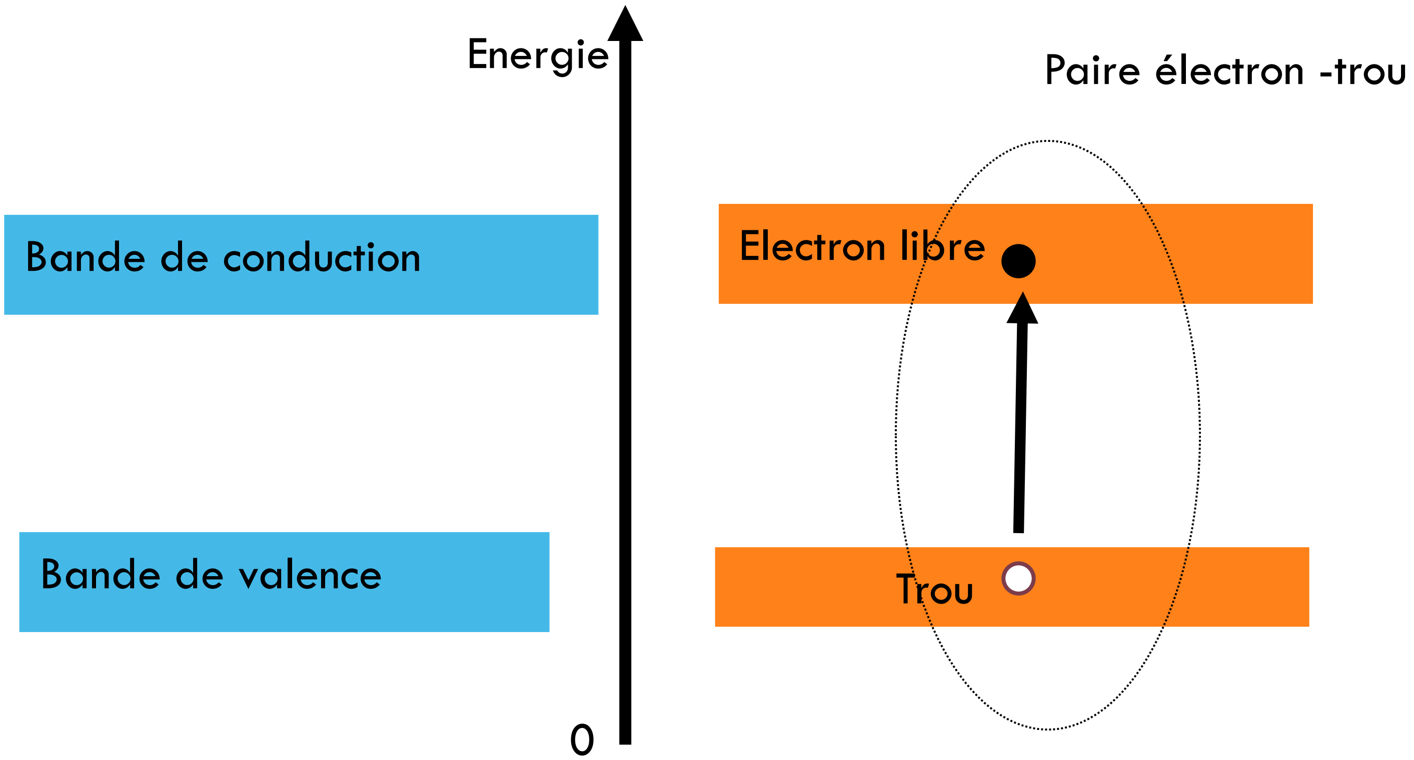



E
BC
E_c
E_F
E_g
E_v
BV
x

Notion d' électron et de trou

- Si on apporte au semi-condcteur une énergie *$E>Eg$* l'**électron** passe de la bande de valence vers la bande de conduction se départ va donner naissance à **un trou**

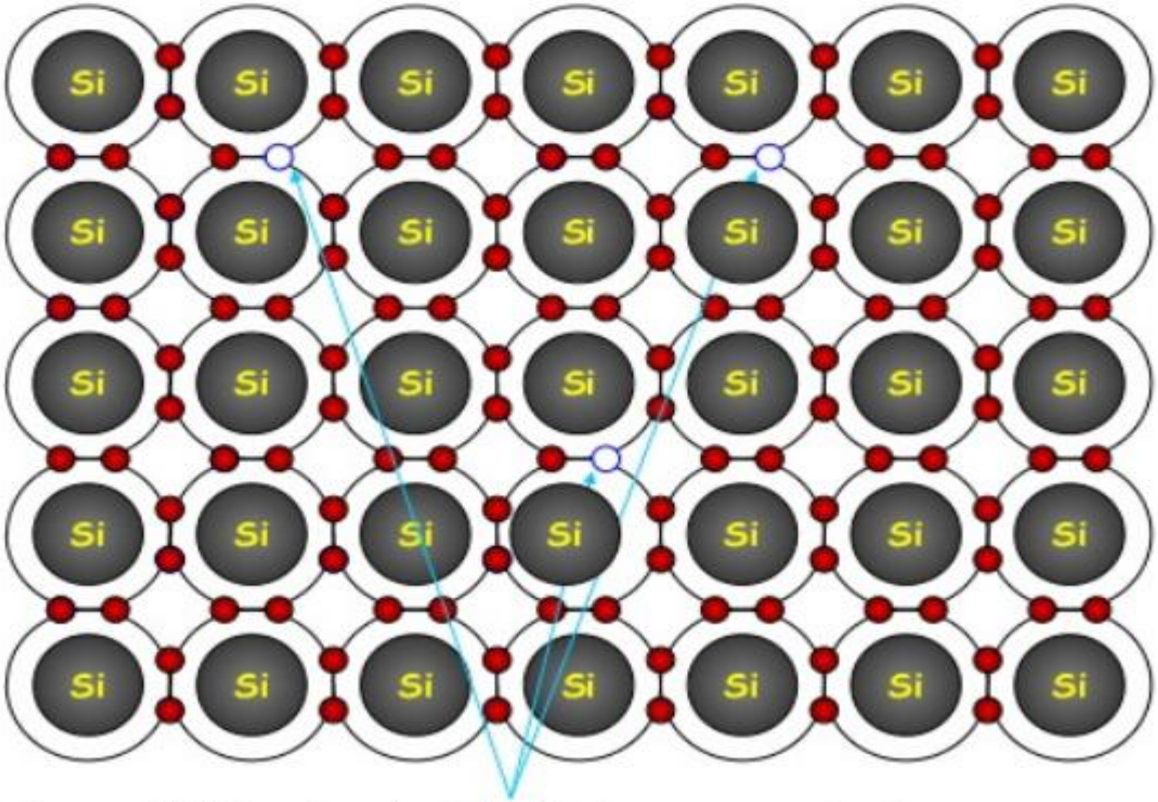
→ **formation d'une paire électron-trou (é-t)**



Création d’une paire électron-trou dans un atome excité de silicium .Un électron dans la bande de conduction est un trou dans la bande de valence.

Notion de trous (+e !)

- La notion de bandes permet d'introduire le porteur de charge positif : un trou



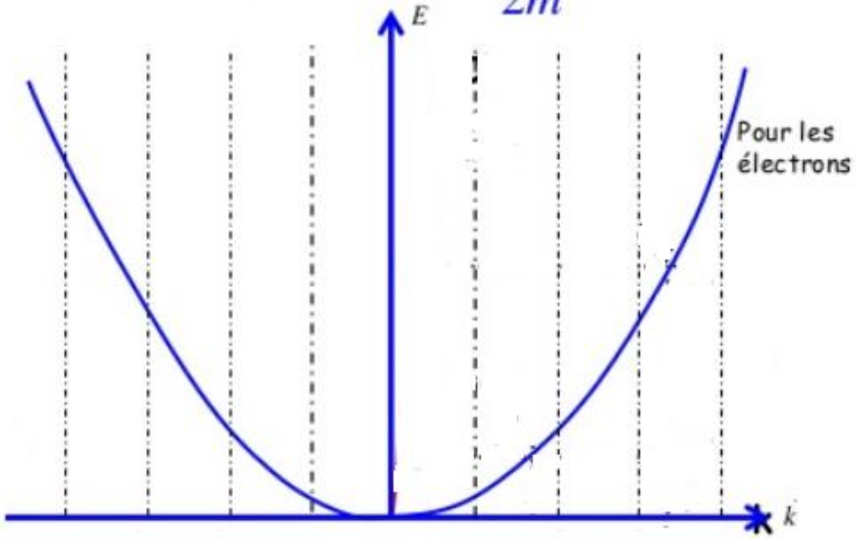
- Aux températures différentes de 0 K, électrons « montent » dans BC, laissent des « trous » dans la BV

Notion de masse effective

Electron dans le vide

- La variation de l'énergie cinétique d'un électron dans le vide en fonction du vecteur d'onde k est parabolique

Traçons: $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$



Cas d'un électron dans la B.C et d'un trou dans la B.V

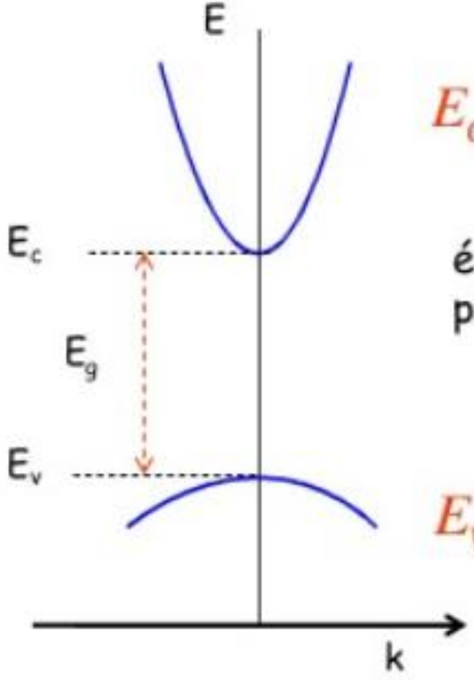
- Soit un électron dans la bande de conduction d'un semi-conducteur. Les électrons sont situé au minimum da la bande de conduction qui correspond à k=0
- Effectuons un développement limité au second ordre de l'énergie valable au voisinage de ce minimum:

$$E(k) = \underbrace{E(k=0)}_{=0} + \frac{\partial E}{\partial k}(k=0)k + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}k^2 = E_c + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}k^2$$

On pose

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}}$$

Donc on peut assimiler la variation de la B.C localement (proche du minimum) à une parabole. C'est l'approximaion parabolique des bandes d'énergie. La relation précédente signifie que un électron dans la B.C se comporte comme un électron dans le vide(é libre) à condition de remplacer sa masse m par une masse fictive m^* qui dépend du matériau: appelée masse effective de l'électron

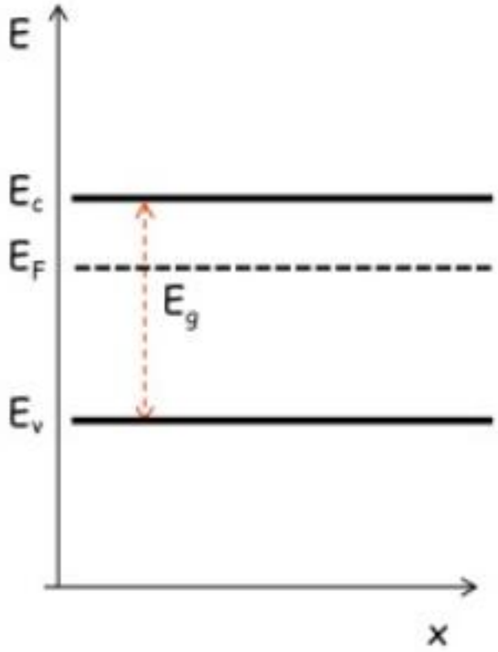


$$E_C(\vec{k}) = E_C + \frac{h^2k^2}{2m_C^*}$$

énergie potentielle

énergie cinétique

$$E_V(\vec{k}) = E_V - \frac{\hbar^2k^2}{2m_V^*}$$



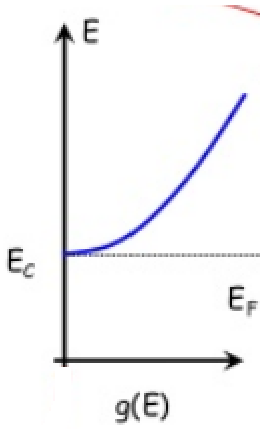
Densité d'état

- Un nombre maximal d'électron peut exister dans un semi-conducteur cette limite fait intervenir une quantité d'énergie que l'on peut stoker par unité de volume: C'est la densité d'état d'énergie en $cm^{-3} J^{-1}$

  Cette densité d'état d'énergie existe pour les électrons et les trous.

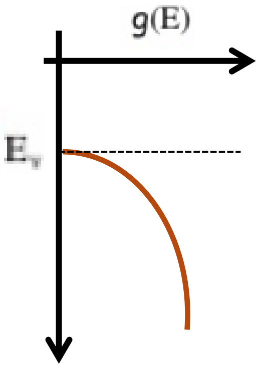
- **Densité d'état pour les électrons dans la B.C**

$$g_C(E) = \frac{1}{4\pi^2} \cdot \left(\frac{2m_C^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} (E - E_C)^{1/2}$$



- **Densité d'état pour les trous dans la B.V**

$$g_V(E) = \frac{1}{4\pi^2} \cdot \left(\frac{2m_V^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} (E_V - E)^{1/2}$$



Répartition des porteurs sur les états d'énergies

Les répartitions de porteurs obéissent à des lois qui peuvent dépendre du type de particules. Trois types de lois peuvent être utilisées:

- La statistique de BOLTZMANN qui s'applique aux gaz parfaits

$$\bar{n} = n_0 \exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right)$$

- La statistique de FERMI-DIRAC pour les particules de spin demi-entier

$$\bar{n} = n_0 \frac{1}{1+\exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right)}$$

- La statistique de BOSE-EINSTEIN pour les particules de spin entier (photons, phonons).

$$\bar{n} = n_0 \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right)-1}$$

Le cas qui nous intéresse correspond à celui des électrons et suit donc la statistique de FERMI-DIRAC.

Fonction de distribution de Fermi-Dirac

La probabilité de présence d'un électron sur un niveau énergétique E sera notée *f (E)*. *Elle est donnée par la formule*

$$\boxed{f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1}}$$

Appelée fonction de distribution de Fermi-Dirac.

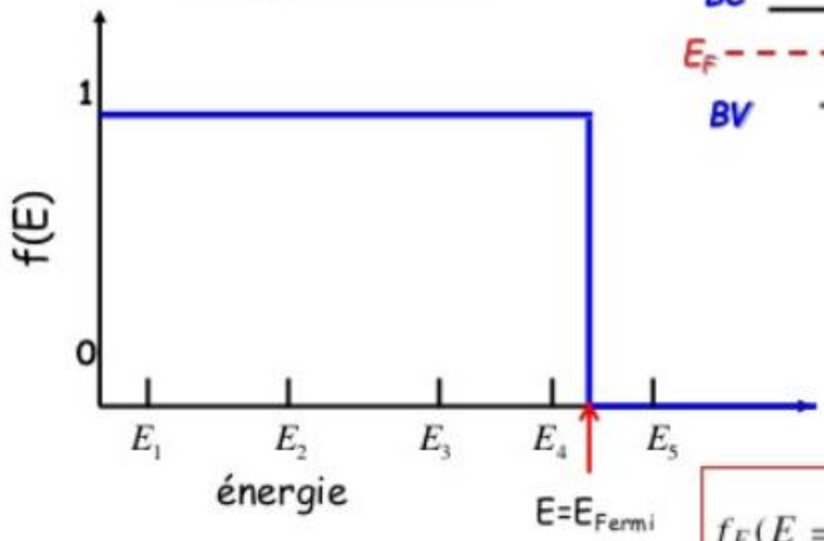
Cette expression fait apparaître un niveau énergétique E_F qui correspond à une probabilité de présence égale à $\frac{1}{2}$:

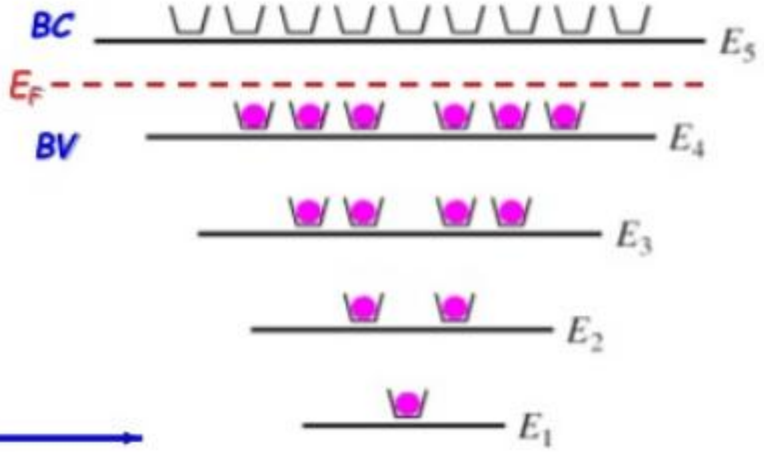
Ce niveau correspond, au zéro absolu, à la séparation entre les niveaux vides et les niveaux pleins.

$$\boxed{f(E)=\frac{1}{e^{(E-E_F)/kT}+1}}$$

À T= 0K: $\begin{cases} E < E_F \Rightarrow f(E)=1 \\ E > E_F \Rightarrow f(E)=0 \end{cases}$

A T = 0, tous les niveaux d'énergie sont remplis à l'énergie **E_F**, appelée **énergie de Fermi**.



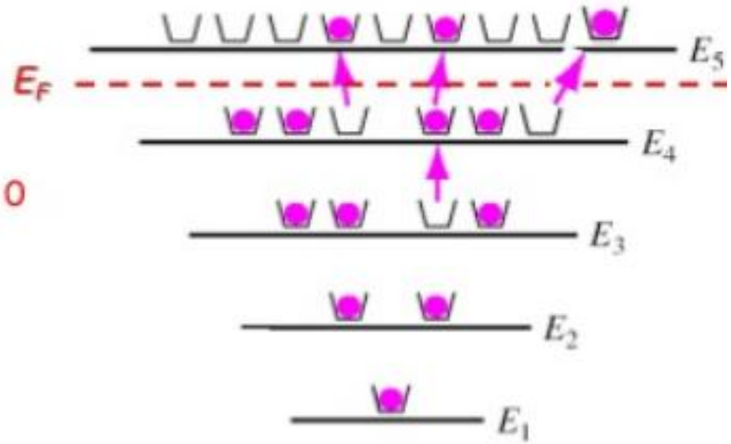


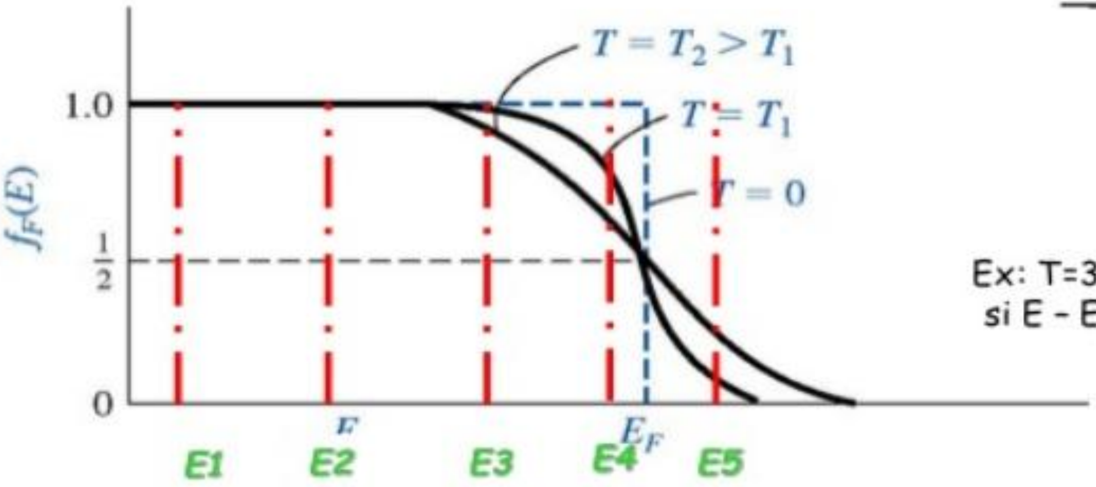
$$\boxed{f_F(E=E_F)=\frac{1}{1+\exp(0)}=\frac{1}{1+1}=\frac{1}{2}}$$

Influence de la température

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1}$$

T# 0





Ex: T=300K,
si $E - E_F = 3kT$, f(E) ?