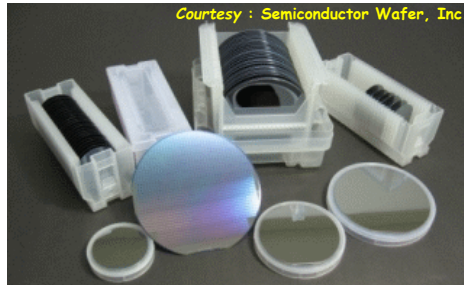


LU3EE200

Techniques et dispositifs pour l'électronique analogique et numérique

Chapitre n°6. Matériaux – Concepts élémentaires



Wafers de silicium

Organisation du chapitre n°6

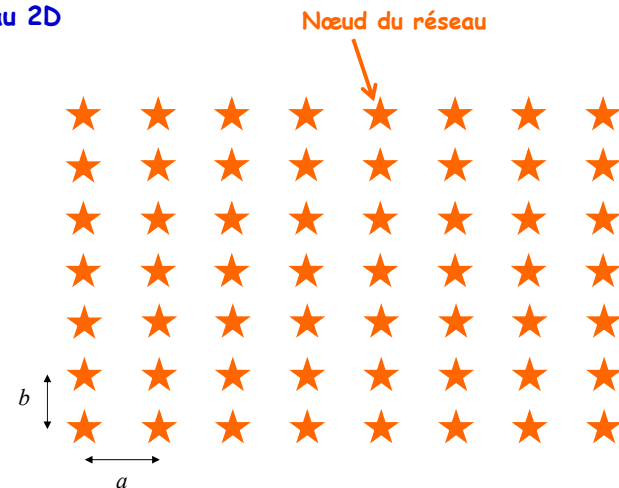
1. **Structure cristalline** : comment bâtir l'édifice cristallin ?
2. **Liaisons cristallines** : comment consolider l'édifice cristallin ?
3. **Modèle des bandes** : comment modéliser le comportement des électrons de valence dans le cristal ?

1. Bâtir l'édifice cristallin : structure cristalline

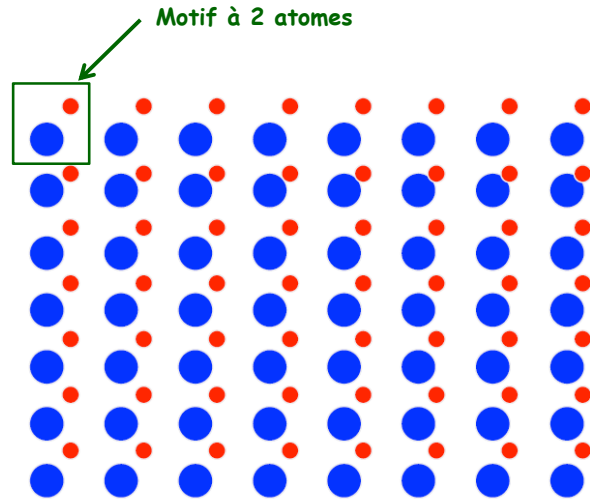
- 1.1 Définitions générales (systèmes 2D)
- 1.2 Systèmes 3D
- 1.3 Directions et plans réticulaires
- 1.4 Diffraction des rayons X

1.1 Définitions générales (2D) : réseau

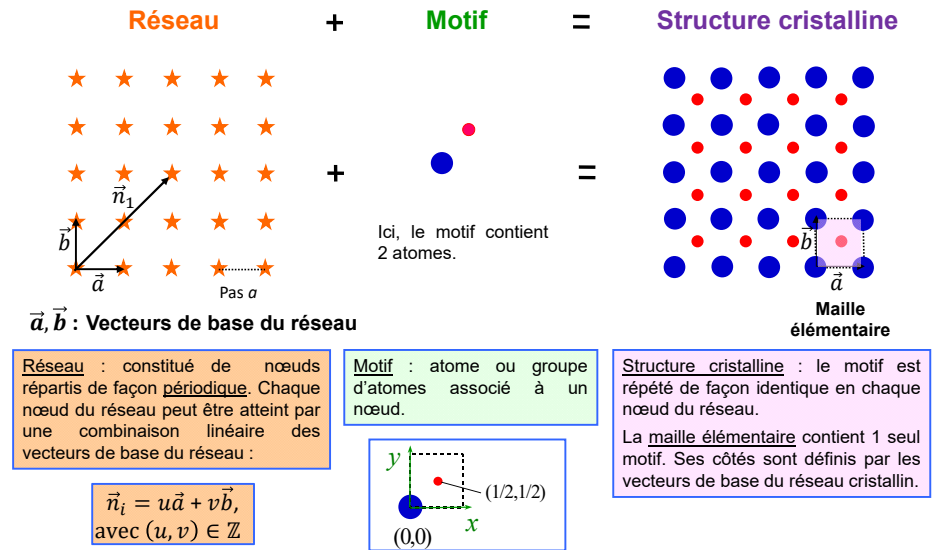
Réseau 2D



1.1 Définitions générales (2D) : motif



1.1 Définitions générales (2D) : structure cristalline

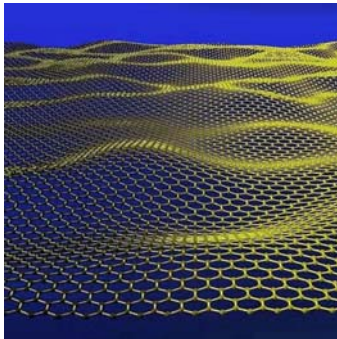


1.1 Un exemple de réseau 2D

Le graphène est un matériau bidimensionnel cristallin, forme allotropique du carbone dont l'empilement constitue le graphite.

Synthétisé en 2004 par Andre Geim, du département de physique de l'université de Manchester, qui a reçu avec Konstantin Novoselov, le prix Nobel de physique en 2010.

Le graphène présente une conductivité thermique pouvant aller jusqu'à $5300 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$.



© Jannik Meyer

1. Bâtir l'édifice cristallin : structure cristalline

1.1 Définitions générales (systèmes 2D)

1.2 Systèmes 3D

1.3 Directions et plans réticulaires

1.4 Diffraction des rayons X

1.2 Systèmes 3D : réseaux de Bravais

4 Lattice Types

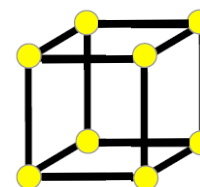
Bravais Lattice	Parameters	Simple (P)	Volume Centered (I)	Base Centered (C)	Face Centered (F)
Triclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} \neq \alpha_{23} \neq \alpha_{31}$				
Monoclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$ $\alpha_{12} \neq 90^\circ$				
Orthorhombic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Tetragonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Trigonal	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} < 120^\circ$				
Cubic	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Hexagonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = 120^\circ$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				

7 Crystal Classes

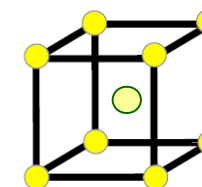
Cubique simple Cubique centré Cubique à faces centrées

1.2 Systèmes 3D : réseaux cubiques

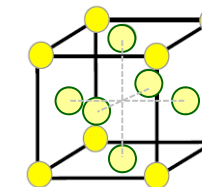
Attention ! Ici, ce sont des nœuds.



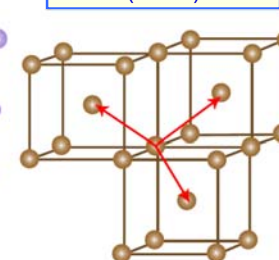
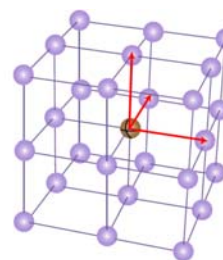
Cubique simple (CS)
Maille élémentaire



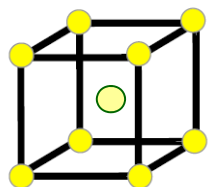
Cubique centré (CC)
Maille d'ordre 2
 $2 = (8 \times 1/8) + 1$



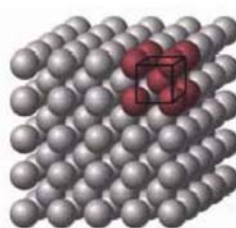
Cubique à faces centrées (CFC)
Maille d'ordre 4
 $4 = (8 \times 1/8) + (6 \times 1/2)$



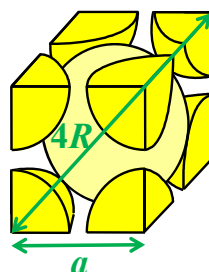
1.2 Systèmes 3D : réseau cubique centré (CC)



Cubique centré (CC)
Maille d'ordre 2
 $2 = (8 \times 1/8) + 1$



Modèle des sphères dures : on positionne sur chaque nœud du réseau un motif à un atome de rayon R .



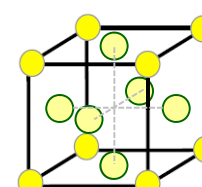
$$a = 4R / \sqrt{3}$$

Volume de la maille :
 $a^3 = 64 R^3 / 3 \sqrt{3}$

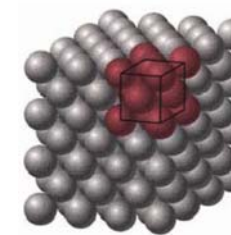
Volume occupé par les atomes dans la maille :
 $V_{at} = 2 \times (4/3) \pi R^3$

$$\text{Compacité} : V_{at} / a^3 = 0,68$$

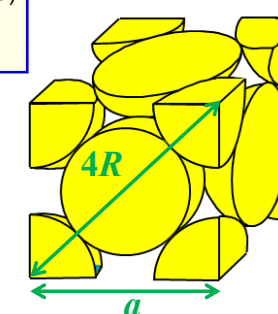
1.2 Systèmes 3D : réseau cubique à faces centrées (CFC)



Cubique à faces centrées (CFC)
Maille d'ordre 4
 $4 = (8 \times 1/8) + (6 \times 1/2)$



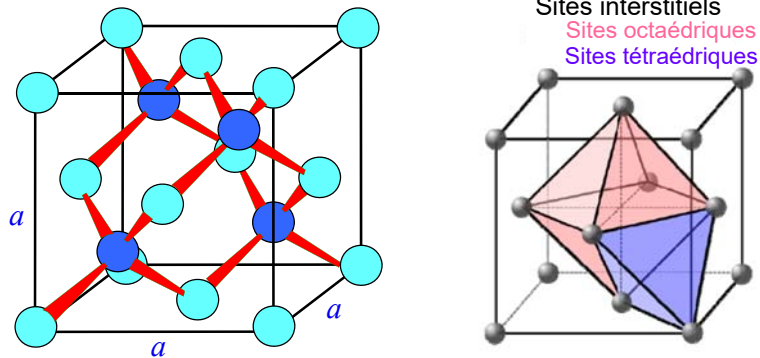
Modèle des sphères dures : on positionne sur chaque nœud du réseau un motif à un atome de rayon R .



$$a = 2\sqrt{2} R$$



Compacité : 0,74

1.2 Réseaux cfc : structure du diamant



Réseau cfc avec motif à 2 atomes identiques (l'un en 000, l'autre en $\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$)

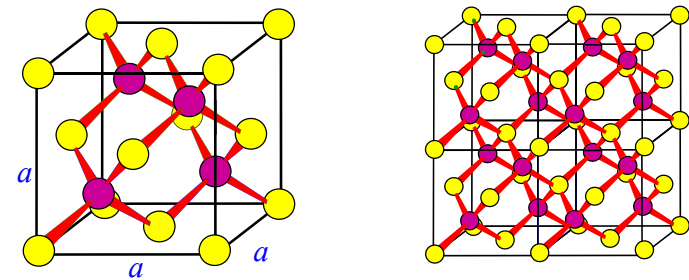
Structure du diamant

= structure CFC  + 4 sites tétraédriques 

Mêmes atomes sur tous les sites.

Matériaux : Si, Ge et C.

1.2 Réseaux cfc : structure de la blende de zinc (ZnS)



Réseau cfc avec motif à 2 atomes différents (l'un en 000, l'autre en $\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$)

Structure de la blende de zinc = structure du diamant mais avec un atome différent sur les sites tétraédriques de celui placé sur les sites CFC.

Matériaux : GaAs, InP, GaP, GaSb, InSb, ZnS, ZnSe...

1. Bâtir l'édifice cristallin : structure cristalline

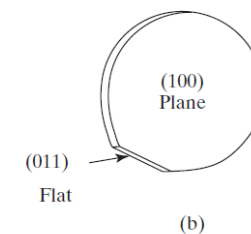
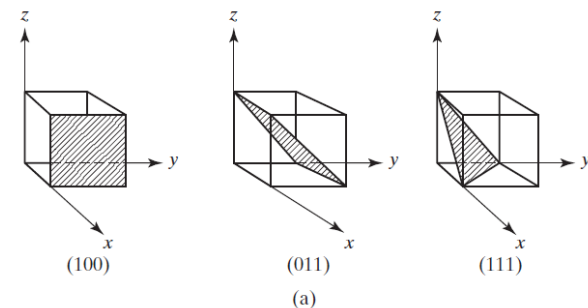
1.1 Définitions générales (systèmes 2D)

1.2 Systèmes 3D

1.3 Directions et plans réticulaires

1.4 Diffraction des rayons X

1.3 Directions et plans réticulaires – Indices de Miller

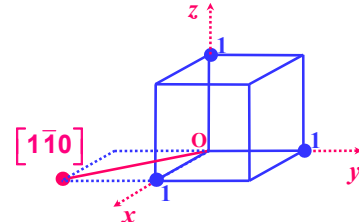
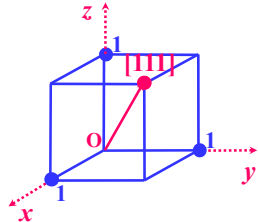
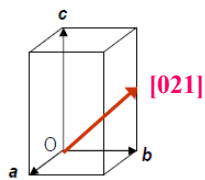
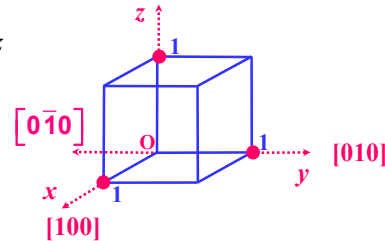


1.3.1 Directions

Comment définir une direction dans un cristal ?

$[h\ k\ \ell]$ – Indices de Miller $[001]$

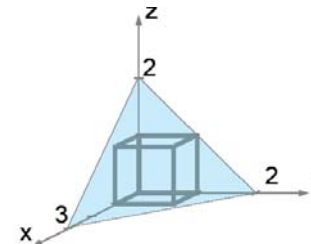
- ❖ Projeter le vecteur sur les axes Ox , Oy et Oz et exprimer ses coordonnées dans la base $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$.
- ❖ Ramener ces coordonnées à des valeurs entières, les plus petites possibles.



1.3.2 Plans (1)

Comment définir un plan dans un cristal ?

$(h\ k\ \ell)$ – Indices de Miller

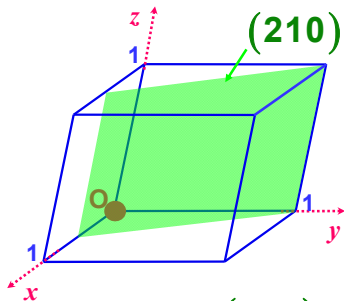


La direction $[h\ k\ \ell]$ est perpendiculaire au plan $(h\ k\ \ell)$.

- ❖ Relever les coordonnées des points d'intersection du plan avec les axes Ox , Oy et Oz dans la base $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$. **Soit : 3 2 2**
- ❖ Prendre les inverses de ces coordonnées. **Soit : 1/3 1/2 1/2**
- ❖ Multiplier ces nombres par le plus petit entier de telle façon que le résultat soit un triplet d'entiers. **Soit : (2 3 3)**

1.3.2 Plans (2)

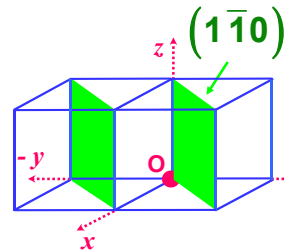
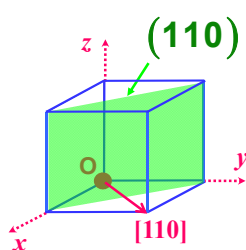
Exemples



➤ Intersection en $1/2\ 1\ \infty$

➤ Inverses : $\frac{1}{1/2}\ \frac{1}{1}\ \frac{1}{\infty}$

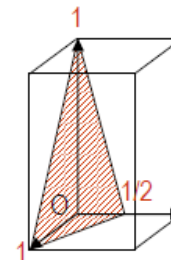
➤ Plan : $(2\ 1\ 0)$



1.3.2 Plans (3)

Représenter le plan (121)

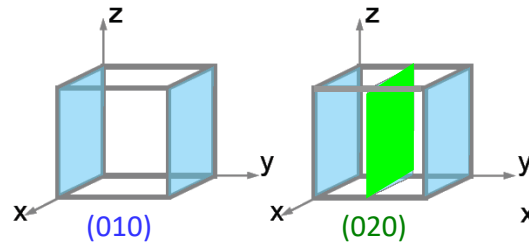
- ❖ Prendre les inverses $1/h, 1/k, 1/\ell$. **Soit : 1/1, 1/2, 1/1**
- ❖ On récupère ainsi les intersections $(a\ b\ c)$ du plan avec les axes Ox , Oy et Oz . **Soit : $a, \frac{1}{2}b, c$**
- ❖ Autre plan parallèle présentant les mêmes indices de Miller : $2a, b, 2c$



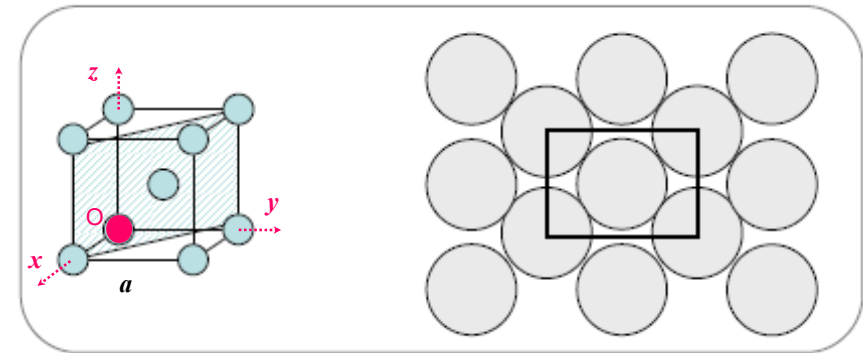
1.3.2 Plans (4)

Tous les plans parallèles n'ont pas forcément les mêmes indices de Miller.

Seuls les plans parallèles qui s'obtiennent par une **translation d'un nombre entier** de paramètres du réseau ont les mêmes indices de Miller.



1.3.3 Concentrations planaires



Représentation 3D

Cubique centré

Plan (110)

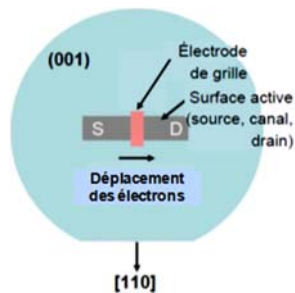
Plan (110) projeté

4 atomes en chaque sommet comptant pour $\frac{1}{4}$
+ 1 atome au centre = 2 atomes

Surface = $a \times a\sqrt{2} = a^2\sqrt{2}$

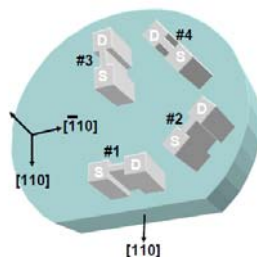
Concentration planaire = $\frac{2}{a^2\sqrt{2}}$ atomes par unité de surface

1.3.4 Application



La **performance** d'un MOSFET dépend fortement de l'**orientation cristallographique** de la surface du canal ainsi que de la direction du courant.

Ainsi pour un MOSFET à canal N, dans lequel le courant est dû aux électrons, une surface de canal à **basse densité atomique** est préférable pour obtenir de meilleures performances du transistor.



Exemple en TD

1. Bâtir l'édifice cristallin : structure cristalline

1.1 Définitions générales (systèmes 2D)

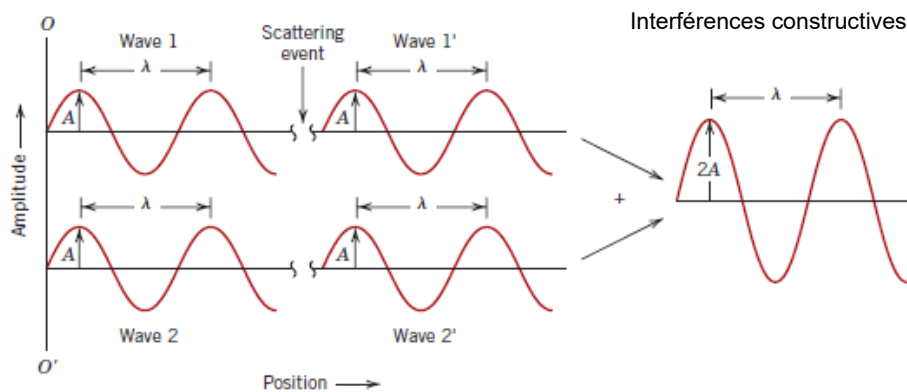
1.2 Systèmes 3D

1.3 Directions et plans réticulaires

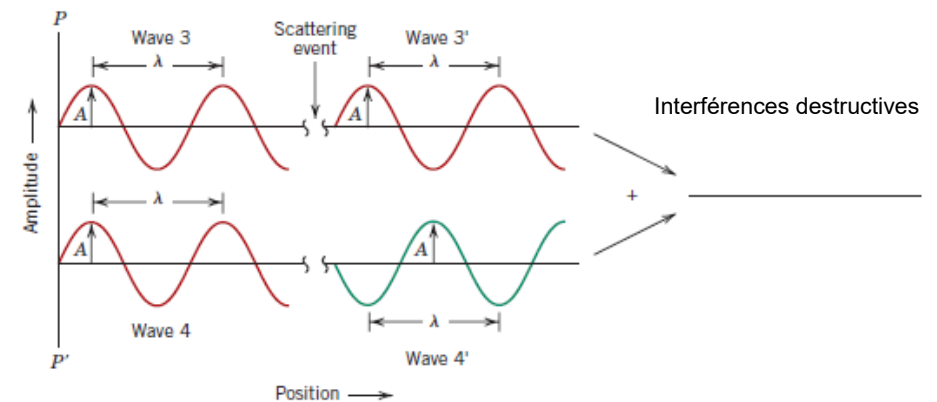
1.4 Diffraction des rayons X

1.4 Diffraction des rayons X (1)

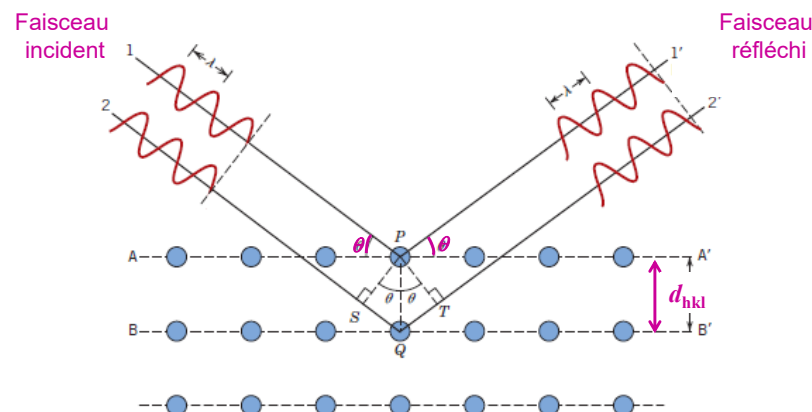
La diffraction apparaît quand une onde rencontre une série d'obstacles régulièrement espacés (distance comparable à l'amplitude de la longueur d'onde) qui vont diffuser (scatter) l'onde. C'est une conséquence de relations de phase spécifiques entre deux ou plusieurs ondes qui ont été diffusées par les obstacles.



1.4 Diffraction des rayons X (2)



1.4 Diffraction des rayons X (3)



Différence de marche entre les faisceaux 1 et 2 : $SQT = 2d_{hkl} \sin \theta$

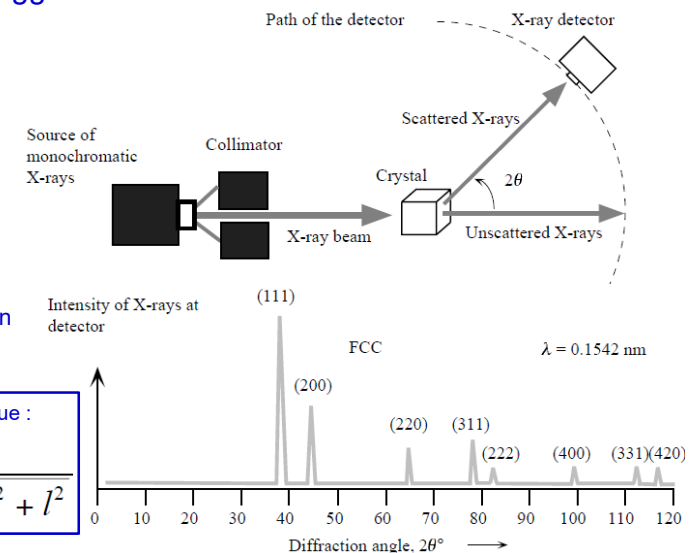
Ainsi : **Relation de Bragg** : $2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$

On choisit en général $n = 1$: $2d_{hkl} \sin \theta = \lambda$

1.4 Diffraction des rayons X (4)

Montage de Bragg-Brentano $\theta - 2\theta$

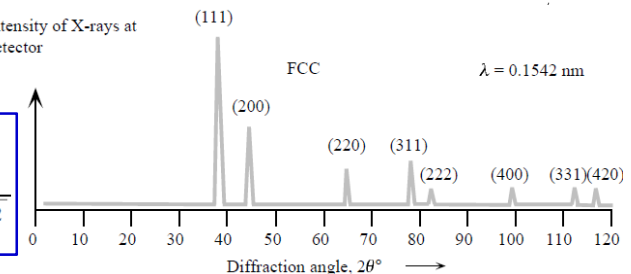
Exemple en TD !



Spectre de diffraction de l'aluminium

Pour le système cubique :

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

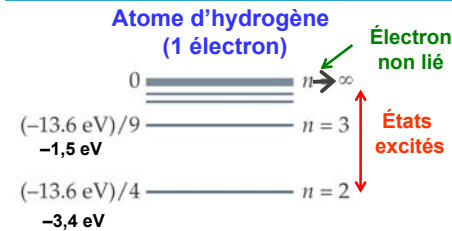


2. Consolider l'édifice cristallin : liaisons cristallines

2.1 Structure atomique

2.2 Liaisons cristallines

2.1.1 Structure atomique : modèle de Bohr de l'atome H



Couche électronique

= niveau d'énergie
= nuage d'électrons

Unité SI de l'énergie : J (joule)

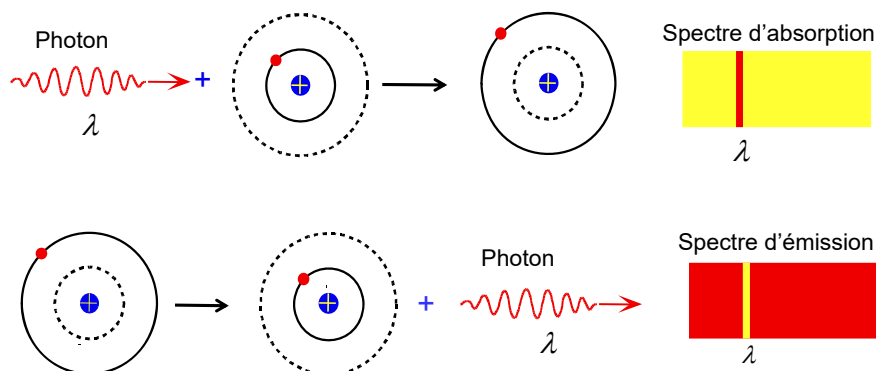
$1 \text{ eV} \approx 1,602 \times 10^{-19} \text{ J}$

Énergie d'ionisation
de l'atome d'hydrogène :

$$W_i = +13,6 \text{ eV}$$

-13.6 eV $n = 1$ État fondamental = état de repos

2.1.1 Structure atomique : modèle de Bohr de l'atome H



D. Callister et al., Materials Science & Engineering, © Wiley & Sons (2011).

2.1.1 Structure atomique : modèle de mécanique quantique de l'atome H

• Principe d'incertitude d'Heisenberg
 $\Delta x \cdot \Delta v \geq \frac{h}{4\pi}$ \rightarrow acte de Planch

$\Delta x, \Delta v$ = incertitudes de mesure de la position x et de la vitesse de l'électron de masse m .

• Éq. de Schrödinger :

\rightarrow comportement des particules

\rightarrow comportement ondulatoire en termes de fonction d'onde ψ ('psi')

La probabilité de trouver l'e- dans une certaine région de l'espace autour du noyau est proportionnelle au carré de la fonction d'onde $|\psi|^2$.



= orbitale atomique de l'électron

= orbitale électronique

(caractérisée par une fonction d'onde ψ)

2.1.2 Structure atomique : nombres quantiques ($n \ell m_\ell \sigma$)

* nombre quantique principal : n (\equiv taille de l'orbitale)
 \rightarrow valeurs entières : 1, 2, 3, ...

* nombre quantique orbital : ℓ (\equiv forme de l'orbitale)

Pour n donnée, ℓ varie de 0 à $(n-1)$

- si $n=1$, $\ell=0$; si $n=2$, $\ell=0$ et $\ell=1$
- $\ell=0$: orbitale s ; • $\ell=1$: orbitale p ; • $\ell=2$: orbitale d

• $n \rightarrow$ couche



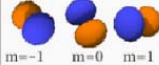


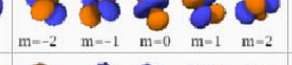


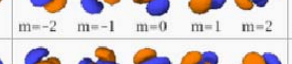







Par ex : la couche $n=2$ est composée de deux sous-couches ($\ell=0$ et $\ell=1$), appelées 2s et 2p

* nombre quantique magnétique : m_ℓ (\equiv orientation de l'orbitale dans l'espace)

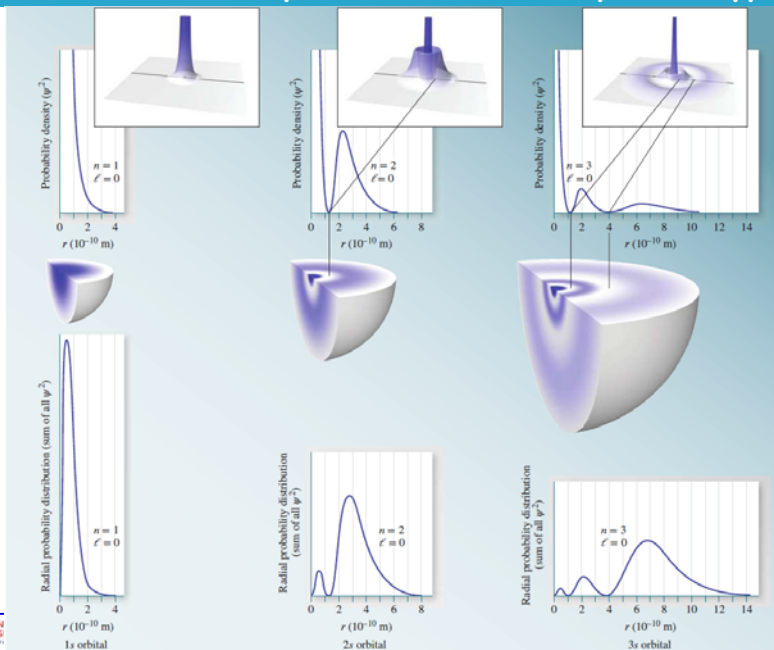
Pour ℓ donnée, m_ℓ varie de $-\ell, \dots, 0, \dots, +\ell$ ($[2\ell+1]$ valeurs possibles)

- si $\ell=0$, $m_\ell=0$; si $\ell=1$, $m_\ell=-1, m_\ell=0, m_\ell=+1$

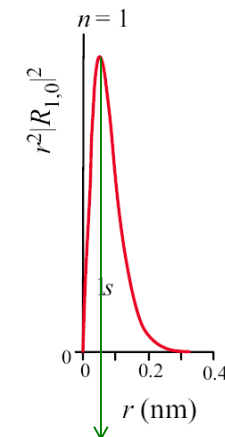
2.1.2 Structure atomique : nombres quantiques ($n \ell m_\ell \sigma$)

	$s (\ell=0)$	$p (\ell=1)$	$d (\ell=2)$	$f (\ell=3)$
$n=1$	 $m=0$			
$n=2$	 $m=0$	 $m=-1, m=0, m=1$		
$n=3$	 $m=0$	 $m=-1, m=0, m=1$	 $m=-2, m=-1, m=0, m=1, m=2$	
$n=4$	 $m=0$	 $m=-1, m=0, m=1$	 $m=-2, m=-1, m=0, m=1, m=2$	 $m=-3, m=-2, m=-1, m=0, m=1, m=2, m=3$
$n=5$	 $m=0$	 $m=-1, m=0, m=1$	 $m=-2, m=-1, m=0, m=1, m=2$	
$n=6$	 $m=0$	 $m=-1, m=0, m=1$		
$n=7$	 $m=0$			
	2 e- 6 électrons au max	10 électrons au max	14 électrons au max	

2.1.3 Structure atomique : orbitales atomiques de type s

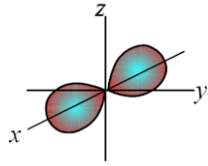


2.1.3 Structure atomique : distribution de probabilité radiale

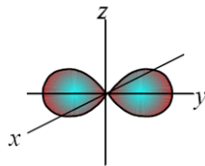


Maximum pour $r = 0,0529 \text{ nm} = \text{rayon de Bohr}$

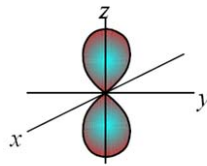
2.1.3 Structure atomique : orbitales atomiques de type p



Orbitale $2p_x$



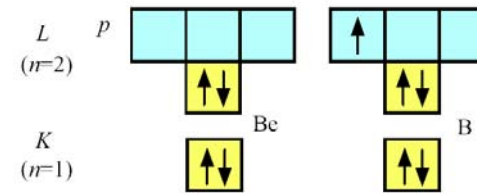
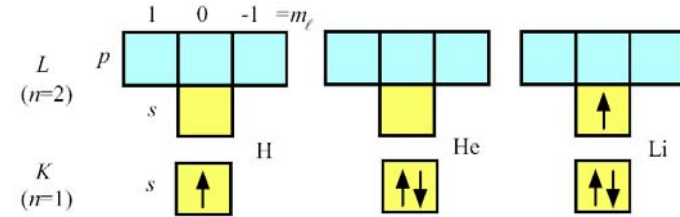
Orbitale $2p_y$



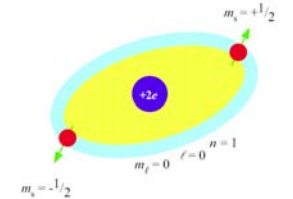
Orbitale $2p_z$

- $n \geq 2, l = 1 \rightarrow p, m_l = -1, 0, +1$
 - Il existe une sous-couche p dans chaque couche $n \geq 2$ et chaque sous-couche contient 3 orbitales (p_x, p_y, p_z)
- Principe de Pauli (n, l, m_l, σ)
- $n=2, l=1, m_l=-1, \sigma=1/2, \sigma=-1/2 \rightarrow 2e^-$
 $n=2, l=1, m_l=0, \sigma=1/2, \sigma=-1/2 \rightarrow 2e^-$
 $n=2, l=1, m_l=1, \sigma=1/2, \sigma=-1/2 \rightarrow 2e^-$
- total pour p : max 6 e^-
- S.O. Kasap (© McGraw-Hill, 2005)

2.1.4 Structure atomique : configuration électronique (1)



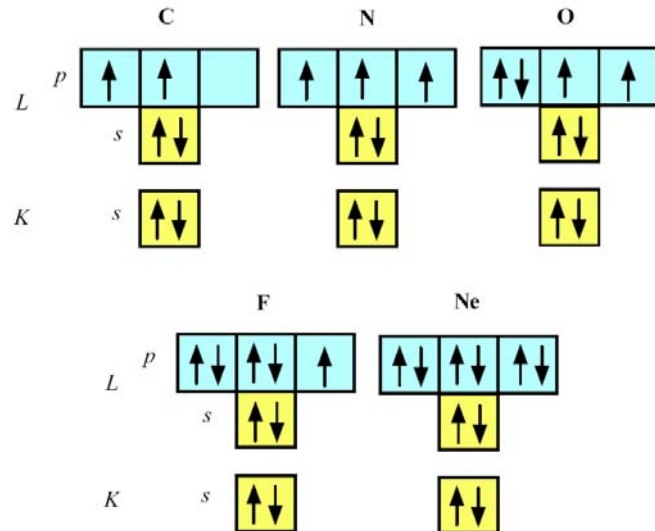
Spins appariés sur une orbitale



S.O. Kasap (© McGraw-Hill, 2005)

2.1.4 Structure atomique : configuration électronique (2)

Configurations permettant de minimiser l'énergie



S.O. Kasap (© McGraw-Hill, 2005)

2.1.4 Structure atomique : configuration électronique (3)

Z	Élément	Configuration électronique
---	---------	----------------------------

1	Hydrogène (H)	$1s^1$
2	Hélium (He)	$1s^2$
3	Lithium (Li)	$1s^2 2s^1$
4	Béryllium (Be)	$1s^2 2s^2$
5	Bore (B)	$1s^2 2s^2 2p^1$
6	Carbone (C)	$1s^2 2s^2 2p^2$
7	Azote (N)	$1s^2 2s^2 2p^3$
8	Oxygène (O)	$1s^2 2s^2 2p^4$
9	Fluor (F)	$1s^2 2s^2 2p^5$
10	Néon (Ne)	$1s^2 2s^2 2p^6$
11	Sodium (Na)	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$
12	Magnésium (Mg)	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
13	Aluminium (Al)	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$
14	Silicium (Si)	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$
15	Phosphore (P)	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$
16	Soufre (S)	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$
17	Chlore (Cl)	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$

Les **électrons de valence** correspondent aux **états sp** de la **couche la plus externe** (maximum 8 électrons de valence).

- H: $1s^1$ (valence = 1)
- C: $[1s^2]2s^2 2p^2$ (valence = 4)
- Si: $[1s^2 2s^2 2p^6]3s^2 3p^2$ (valence = 4)
- Fe: $[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6]4s^2$ (valence = 2)
- Cu: $[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6]4s^1$ (valence = 1)

Dans la suite de ce cours, on ne s'intéresse qu'aux **électrons de valence** car ils peuvent être **rendus libres (porteurs de charges libres)**, i.e. disponibles pour la conduction électrique.

2.1.5 Structure atomique : tableau périodique des éléments

PERIODES	GROUP I	GROUP II	Transition elements	GROUP III	GROUP IV	GROUP V	GROUP VI	GROUP VII	GROUP VIII
1	1.01 1s ¹								2.00 1s ²
2	3.01 2s ¹	4.01 2s ²							10.01 2s ²
3	11.01 3s ¹	12.01 3s ²							18.01 3s ²
4	19.01 4s ¹	20.01 4s ²							26.01 4s ²
5	37.01 5s ¹	38.01 5s ²							36.01 5s ²
6	55.01 6s ¹	56.01 6s ²							54.01 6s ²
7	87.01 7s ¹	88.01 7s ²							86.01 7s ²

Atomic number: 26 Fe Symbol: Fe Atomic mass: 58.85 Outer electron configuration: 3d⁶4s²

Métaux Non métaux

Métaux alcalins Métaux alcalino-terreux

Chalcogènes Halogènes Gaz rares

Lanthanides Actinides

2. Consolidar l'édifice cristallin : liaisons cristallines

2.1 Structure atomique

2.2 Liaisons cristallines

2.1.5 Semi-conducteurs élémentaires et composites

GROUP I	GROUP II	GROUP III	GROUP IV	GROUP V	GROUP VI	GROUP VII	GROUP VIII
1.01 1s ¹	2.01 1s ²	3.01 1s ¹	4.01 1s ²	5.01 1s ¹	6.01 1s ²	7.01 1s ¹	8.01 1s ²
9.01 2s ¹	10.01 2s ²	11.01 2s ¹	12.01 2s ²	13.01 2s ¹	14.01 2s ²	15.01 2s ¹	16.01 2s ²
17.01 3s ¹	18.01 3s ²	19.01 3s ¹	20.01 3s ²	21.01 3s ¹	22.01 3s ²	23.01 3s ¹	24.01 3s ²
25.01 4s ¹	26.01 4s ²	27.01 4s ¹	28.01 4s ²	29.01 4s ¹	30.01 4s ²	31.01 4s ¹	32.01 4s ²
33.01 5s ¹	34.01 5s ²	35.01 5s ¹	36.01 5s ²	37.01 5s ¹	38.01 5s ²	39.01 5s ¹	40.01 5s ²
41.01 6s ¹	42.01 6s ²	43.01 6s ¹	44.01 6s ²	45.01 6s ¹	46.01 6s ²	47.01 6s ¹	48.01 6s ²
49.01 7s ¹	50.01 7s ²	51.01 7s ¹	52.01 7s ²	53.01 7s ¹	54.01 7s ²	55.01 7s ¹	56.01 7s ²

numéro atomique masse atomique structure électronique

Be Beryllium

solide liquide gaz

nom

GAZ RARES

He Hélium

Li Lithium

Be Beryllium

Na Sodium

Mg Magnésium

K Potassium

Ca Calcium

Sc Scandium

Ti Titane

V Vanadium

Cr Chrome

Mn Manganèse

Fe Fer

Co Cobalt

Ni Nickel

Cu Cuivre

Zn Zinc

Ga Gallium

Ge Germanium

As Arsenic

Se Sélénium

Br Brome

Kr Krypton

Rb Rubidium

Sr Strontium

Y Yttrium

Zr Zirconium

Nb Niobium

Mo Molybdène

Tc Technétium

Ru Ruthénium

Rh Rhodium

Pd Palladium

Ag Argent

Cd Cadmium

In Indium

Sn Étain

Sb Antimoine

Te Tellure

I Iode

Xe Xénon

Cs Césium

Ba Barium

La* Lanthane

Hf Hafnium

Ta Tantale

W Tungstène

Re Rhenium

Os Osmium

Ir Iridium

Pt Platine

Au Or

Hg Mercure

Tl Thallium

Pb Plomb

Bi Bismuth

Po Polonium

At Astatine

Rn Radon

Ce Cérium

Pr Praseodyme

Nd Néodyme

Pm Prométhée

Sm Samarium

Eu Europium

Gd Gadolinium

Tb Terbium

Dy Dysprosium

Ho Holmium

Er Erbium

Tm Thulium

Yb Ytterbium

Lu Lutétium

Th Thorium

Pa Protactinium

U Uranium

Np Neptunium

Pu Plutonium

Am Americium

Cm Curium

Bk Bérium

Cf Californium

Es Einsteinium

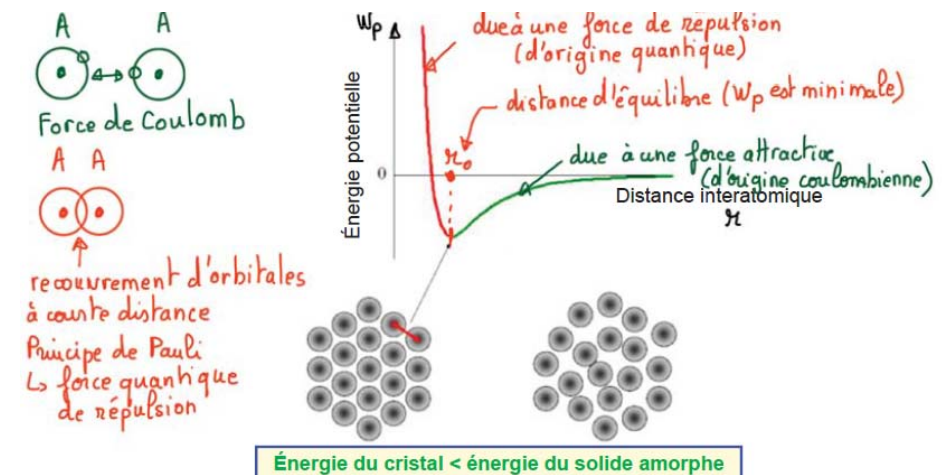
Fm Fermium

Md Mendélévium

No Nobelium

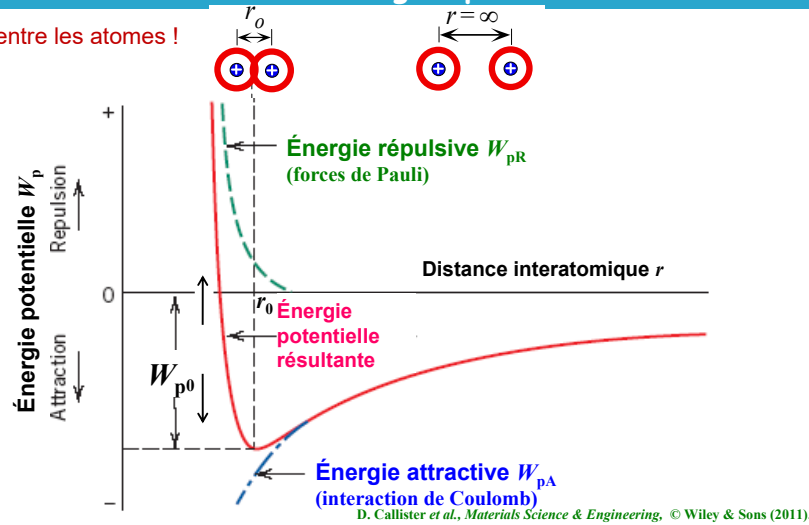
Lw Lawrencium

2.2 Liaisons cristallines : pourquoi les atomes s'assemblent-ils de façon ordonnée ?



2.2.1 Liaisons cristallines : énergies potentielles

Liaisons entre les atomes !



r_0 = distance d'équilibre (distance moyenne), pour laquelle W_p est minimale.
 $W_{p0} = |W_p(r=r_0)| > 0$: **énergie de cohésion du cristal** (énergie à fournir au cristal pour briser ses liaisons)

2.2.2 Liaisons cristallines : types de liaisons

❖ Liaisons primaires :

Transfert ou partage d'électrons

Énergies élevées (100 à 1000 kJ/mol ou 1-10 eV/atome)

- Métallique : Na, Mg, Al, Ti, Mn, Fe...
- Ionique : Na^+Cl^- ...
- Covalente : C, Si, Ge...

❖ Liaisons secondaires :

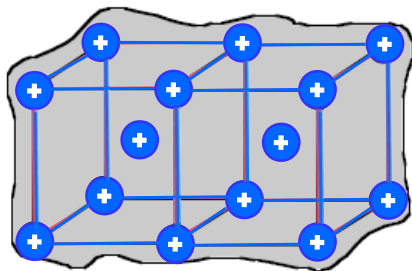
Pas de transfert ni de partage d'électrons

Interactions entre dipôles atomiques ou moléculaires

Énergies faibles (< 100 kJ/mol ou < 1 eV/atome)

- Dipôles induits fluctuants : gaz inertes, H_2 , cristaux organiques...
- Dipôles permanents : molécules polaires (H_2O , HCl ...)

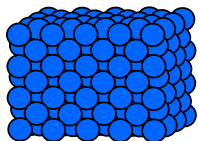
2.2.3 Liaisons cristallines : liaison métallique



Cœur de l'ion positif
 (noyau + électrons de cœur)
 → Réseau cristallin

Gaz d'électrons de conduction
 (les électrons de valence sont libres, modèle du jellium)

Matériaux à 1, 2 ou 3 électrons de valence :
 cuivre, aluminium...

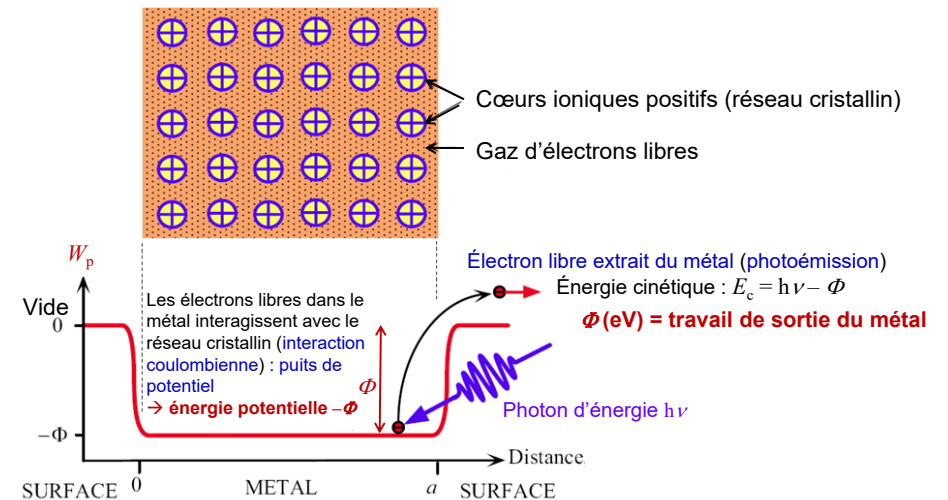


Dans un métal, les électrons situés sur les orbitales les plus externes sont faiblement liés à l'atome.

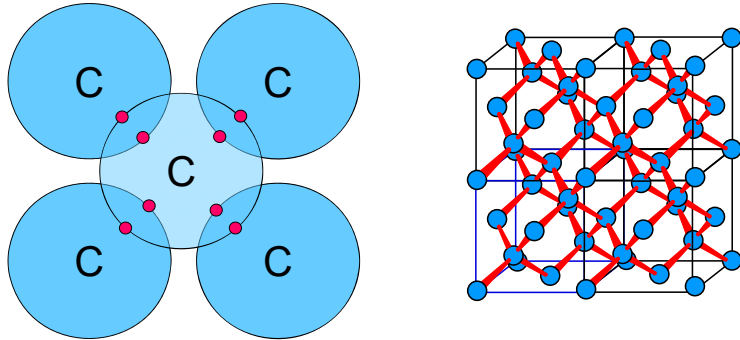
À 20°C, du fait de l'énergie thermique ainsi fournie, ces électrons sont libres de se déplacer entre les atomes.

Ces **électrons libres** sont responsables de la **conduction électrique** du métal.

2.2.3 Liaisons cristallines : liaison métallique (2)



2.2.4 Liaisons cristallines : liaison covalente



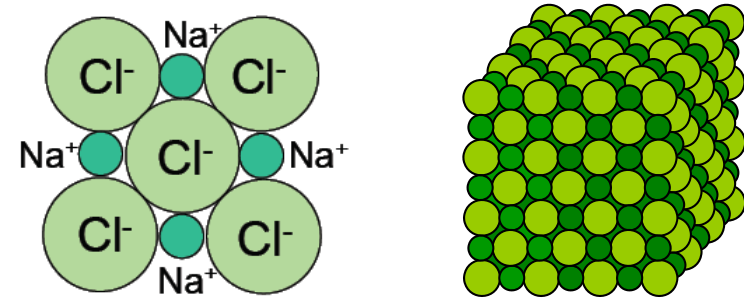
Matériaux à 4 électrons de valence : C, Si, Ge

Lien covalent = bras covalent : partage des électrons de valence entre les atomes

→ **liaison dirigée, structure ouverte**

Existe aussi pour des éléments à 5, 6 ou 7 électrons de valence.

2.2.5 Liaisons cristallines : liaison ionique



Des électrons passent des atomes Na aux atomes Cl.

Les ions ainsi formés s'assemblent pour former la structure cristalline qui produit la plus forte attraction (interaction coulombienne) compatible avec la répulsion à courte distance entre les ions (résistance à l'interpénétration des nuages électroniques).

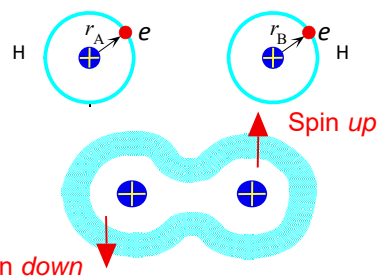
2.2.6 Liaisons cristallines : résumé

Liaison	Nature	Structure	Propriétés électriques	Propriétés mécaniques
Métallique	Non dirigée	Compacte	Conducteurs	Ductiles
Covalente	Dirigée (bras de liaisons)	Ouverte	Semi-conducteurs ou isolants	Non-ductiles
Ionique	Non dirigée	Compacte	Isolants	Non-ductiles

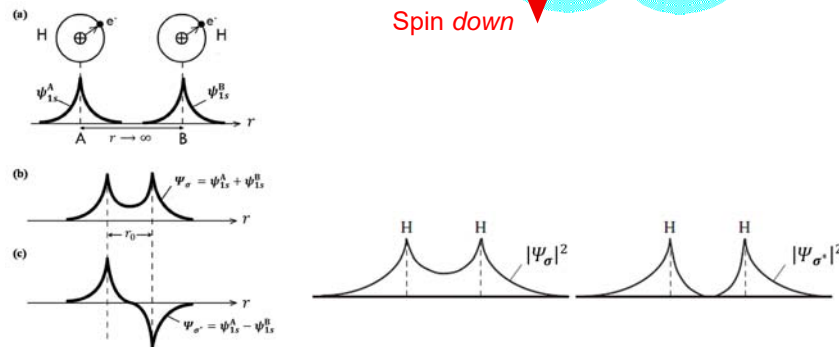
3. Modéliser le comportement des électrons de valence dans le cristal : modèle des bandes

3.1 Modèle des bandes : molécule H₂

2 atomes éloignés l'un de l'autre

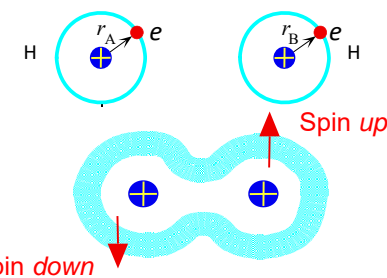


2 atomes rapprochés l'un de l'autre
Recouvrement des orbitales

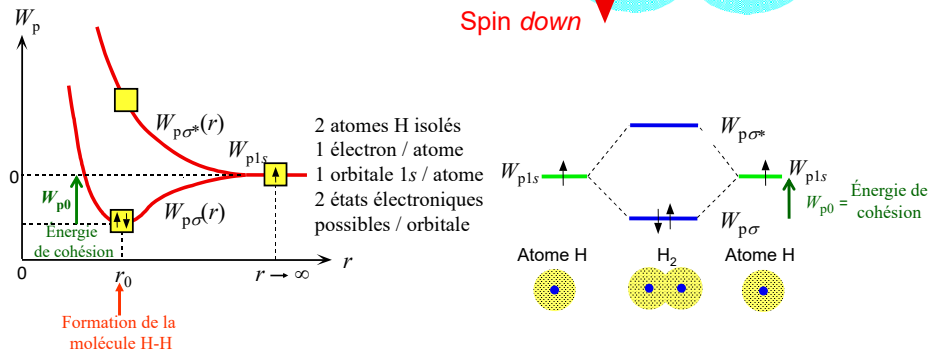


3.1 Modèle des bandes : molécule H₂

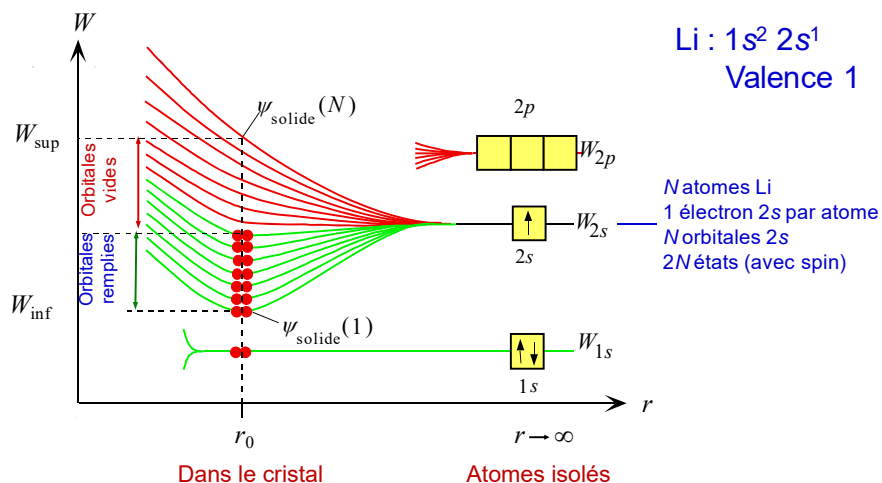
2 atomes éloignés l'un de l'autre



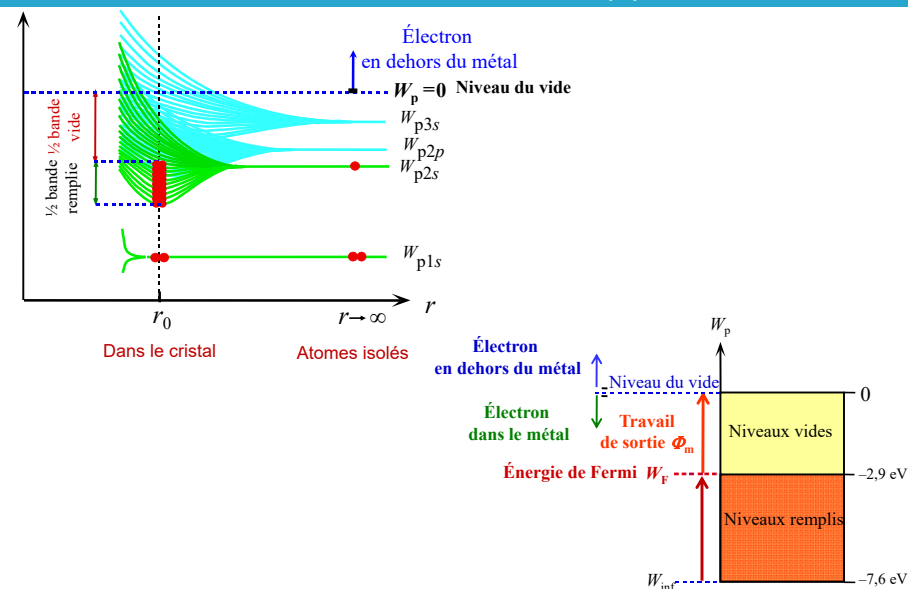
2 atomes rapprochés l'un de l'autre
Recouvrement des orbitales



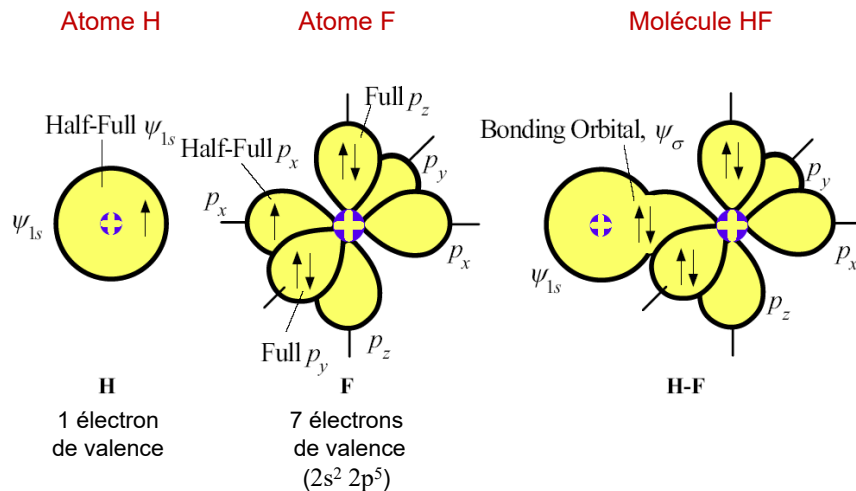
3.2 Modèle des bandes : métal lithium (1)



3.2 Modèle des bandes : métal lithium (2)

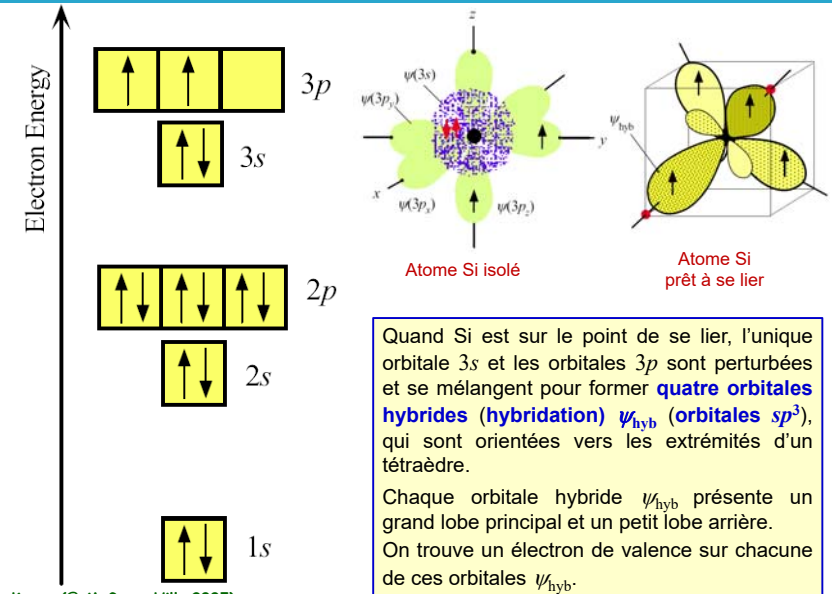


3.3 Modèle des bandes : molécule HF



S.O. Kasap (© McGraw-Hill, 2005)

3.4 Modèle des bandes : semi-conducteur silicium (1)

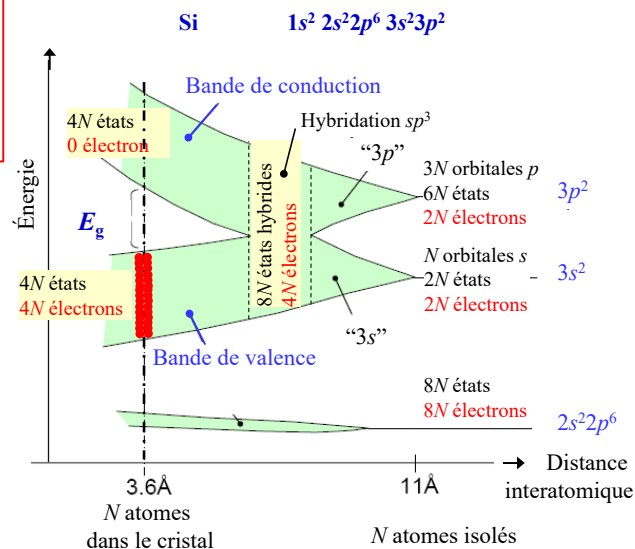


S.O. Kasap (© McGraw-Hill, 2005)

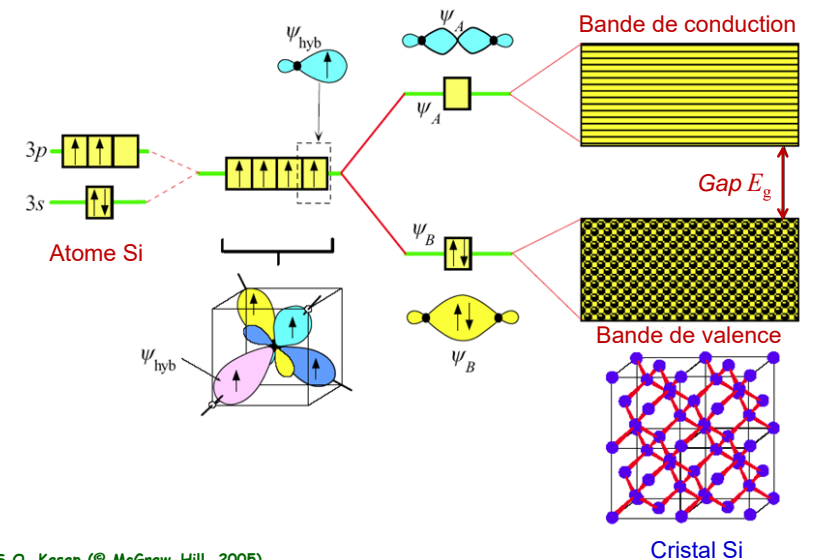
3.4 Modèle des bandes : semi-conducteur silicium (2)

Les $4N$ électrons dans la bande de valence sont partagés entre les atomes (= ils sont engagés dans les liaisons covalentes) et ne participent donc pas à la conduction électrique.

Pour que des électrons de valence participent à la conduction électrique, ils doivent franchir la bande interdite (gap) d'énergie E_g . Ils se retrouvent alors dans la bande de conduction où ils sont libres (apport d'énergie).

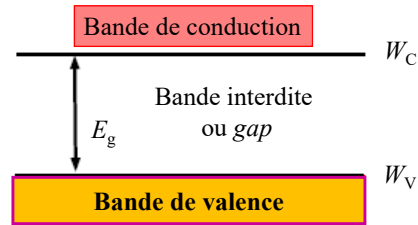


3.4 Modèle des bandes : semi-conducteur silicium (3)



S.O. Kasap (© McGraw-Hill, 2005)

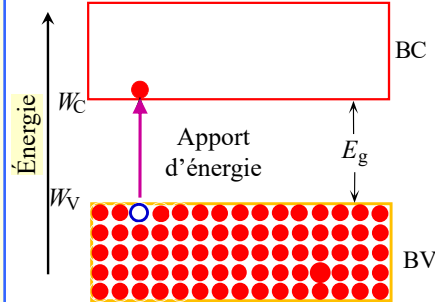
3.4 Modèle des bandes : semi-conducteur



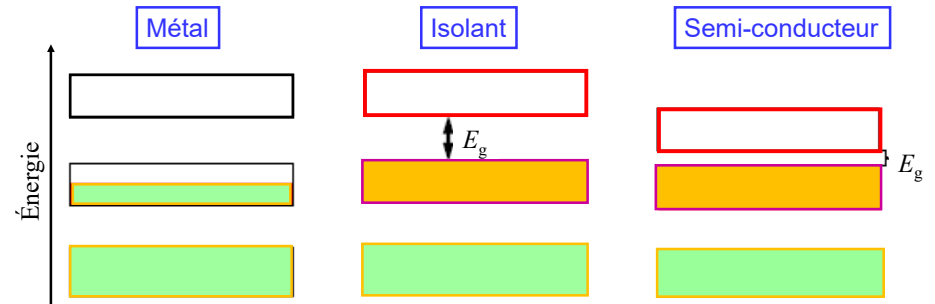
❖ À 0 K, la BV est complètement remplie avec les électrons. La BC est vide. Le semi-conducteur est isolant.

❖ Un apport d'énergie suffisant conduit à faire passer des électrons de la BV à la BC.

❖ Les états laissés vacants par ces électrons se comportent comme des particules fictives appelées « trous ».



3.5 Modèle des bandes : résumé



❖ Métal : la bande occupée la plus élevée est partiellement remplie.

❖ Isolant : *gap* très grand (par exemple, pour le diamant : $E_g = 5,47$ eV).

❖ Semi-conducteur : *gap* de largeur modérée (0,5 à 3 eV ; par exemple pour Si : $E_g = 1,12$ eV). La bande de valence est remplie à 0 K.