

Il y a donc deux distances différentes entre les atomes O et H :

- courte distance : liaison covalente O-H (98 pm)
- longue distance : liaison hydrogène O - - H (177 pm)

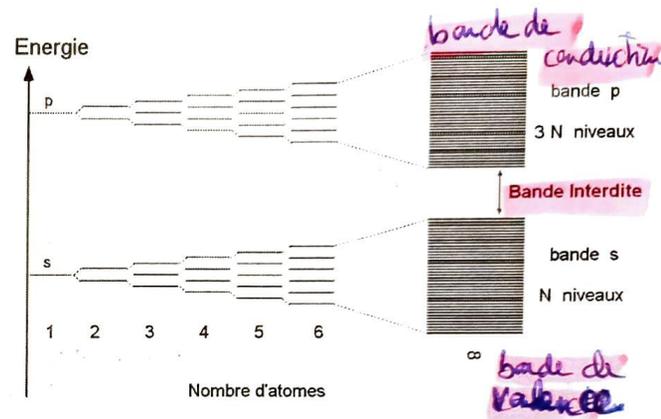
## 5. STRUCTURE ÉLECTRONIQUE DES CRISTAUX : BANDES D'ÉNERGIE

Cette structure ne concerne que les cristaux dont la cohésion est assurée par le recouvrement d'orbitales atomiques : les cristaux métalliques et covalents et dans certains cas les cristaux ioniques à caractère covalent.

### 5.1 Notion de bande d'énergie

Pour un atome isolé, les niveaux d'énergie sont discrets. L'interaction entre deux atomes conduit à la formation d'orbitales moléculaires liantes et antiliantes, toujours de niveau discret.

Mais si le nombre N d'atomes en interaction augmente jusqu'à l'échelle de la mole, les niveaux discrets des orbitales moléculaires formées à partir des N orbitales atomiques deviennent infiniment proches et finissent par former une bande continue d'énergie contenant N niveaux compris entre le niveau le plus bas totalement liant et le niveau le plus haut totalement antiliant.

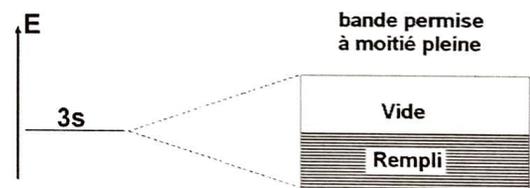


La zone située entre les bandes ainsi formées n'est pas accessible et forme la bande interdite.

### 5.2 Exemples de conducteurs

#### 5.2.1 Le sodium

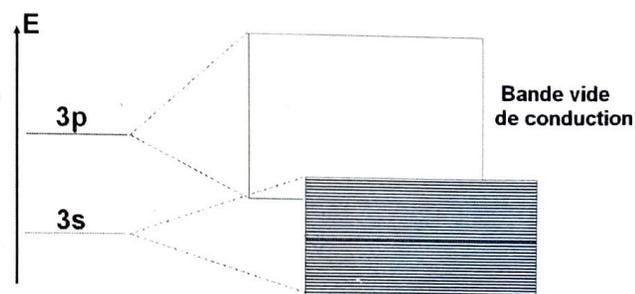
Na :  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ . La bande de valence 3s formée à partir de N atomes contient N niveaux sur lesquels on doit placer N électrons. Chaque niveau pouvant accepter deux électrons, cette bande ne contient donc que N/2 niveaux remplis et est donc à moitié pleine.



Un très faible apport d'énergie permet à un électron de passer dans un niveau supérieur. De ce fait les électrons sont très mobiles ce qui caractérise un métal conducteur.

#### 5.2.2 Le magnésium

Mg :  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ . Dans ce cas, la bande 3s est saturée avec 2N électrons et c'est le recouvrement partiel entre les bandes 3s et 3p qui permet au magnésium de se comporter comme un métal.

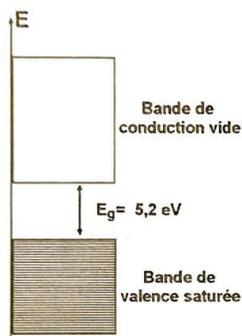


### 5.2.3 Conductivité

Il faut remarquer que la conductivité d'un métal diminue avec la température. En effet, les vibrations du réseau cristallin en augmentant perturbent le mouvement des électrons.

La conductivité d'un métal est de l'ordre de :  $\gamma = 10^7 \text{ S.m}^{-1}$ .

### 5.3 Exemple d'isolant : le diamant



La bande de valence est totalement remplie et la bande de conduction est vide. La largeur de la bande interdite  $E_g$  ( $g = \text{gap}$ ) est trop importante pour permettre aux électrons de passer dans la bande de conduction.

Un isolant ne possède pas d'électrons libres et sa conductivité est de l'ordre de :  $\gamma = 10^{-16} \text{ S.m}^{-1}$ .

### 5.4 Exemple de semi-conducteur : le silicium

#### 5.4.1 Conductivité intrinsèque

Dans un semi-conducteur, la structure de bande est la même que pour un isolant mais la largeur de la bande interdite est beaucoup plus faible. Par exemple, dans la colonne du carbone, on constate que le caractère métallique augmente lorsque l'on descend dans un groupe :

Elément	C	Si	Ge	Sn
$E_g$ (eV)	5,2	1,12	0,66	0,08

Dans un semi-conducteur, l'agitation thermique permet alors à quelques électrons de passer de la bande de valence dans la bande de conduction en laissant, lors de ce passage, des trous positifs dans la bande de valence correspondant à des niveaux vides.

Il apparaît alors une conduction électrique par un double mécanisme de paire électron-trou positif se déplaçant à des vitesses différentes dans le cristal.

La conductivité du silicium augmente fortement avec la température et est multipliée par un facteur  $10^6$  entre 300 et 500 K. ( $\gamma = 10^{-4} \text{ S.m}^{-1}$  à 300 K)

#### 5.4.2 Dopage

Il est possible d'augmenter de manière contrôlée la conductivité des semi-conducteurs en introduisant dans leur réseau cristallin une impureté en concentration très faible de l'ordre de quelques ppm.

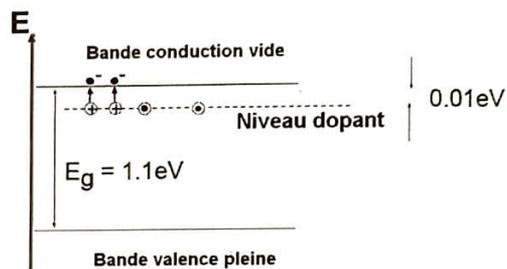
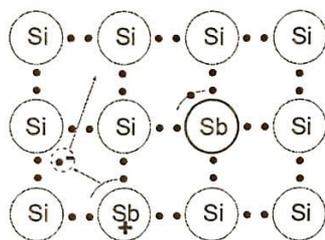
Par exemple, pour le silicium qui possède 4 électrons de valence, si on introduit une impureté ayant 5 électrons de valence comme l'antimoine Sb, le cinquième électron va se situer sur des niveaux discrets juste en dessous de la bande de conduction et permettre ainsi un peuplement d'électrons dans cette bande.

On obtient alors un semi-conducteur dopé **n** : renforcement de la conduction par électron négatif.

Inversement, si on dope du silicium avec une impureté ayant 3 électrons de valence comme le gallium Ga, ce sont des niveaux discrets vides qui deviennent accessibles.

On obtient alors un semi-conducteur dopé **p** : renforcement de la conduction par trou positif.

**Dopage de type n**



**Dopage de type p**

