

## LC3 : Modèle des bandes

Élément imposé : Conduction électrique, Distorsion de Peierls, Dopage de semi-conducteurs

Biblio : Cours M.Vérot, Canadell, Marucco, schéma leçon loic

Niveau : L3

Prérequis : Configuration électronique, Gaz d'électron libre : modèle et interprétation, méthode de Huckel : hypothèse et principe, construction d'un diagramme moléculaire, propriétés des métaux, equation de Schrodinger,

Notion de bandes

Intro pédagogique : Objectifs : comprendre le principe de construction d'un diagramme de bandes.  
+ Interprétation

### Introduction

Modèle du gaz d'électrons libres → premier aspect des bandes d'énergie mais ne décrit pas tous les cas. N'explique pas les isolants et semi-conducteurs

IUNG p 14 et cours M.Vérot GEL vs Diagramme réel

Le modèle du gaz d'électron libre prévoit déjà que les électrons sont délocalisés sur l'ensemble des solides.

Autre modèle : description via les orbitales atomiques

## I. Construction d'un diagramme de bande

### A. Orbitales cristallines

- Chaîne linéaire de 1s, étude de  $H_n$  Cours M.Vérot, Canadell p 57
- Problème : symétrie de translation non respectée : Schéma Canadell p54
- Description en cercle, Born Von Karman, Groupe de symétrie  $C_n$ , Décomposition en RI
- Projection pour obtenir les orbitales de symétrie
- Définition du vecteur  $k$ , des fonctions de Bloch et de la 1ere zone de Brillouin, Canadell p67

### B. Énergie des orbitales

- On injecte dans l'équation de Schrodinger
  - Paramétrisation de Huckel, rappel des hypothèses :  $\alpha, \beta \rightarrow E_k = \alpha + 2\beta\cos(ka)$ .
  - Allure des fonctions d'onde et énergie Canadell p67
  - Niveau de Fermi : niveau d'énergie le + haut occupé à 0K,  $E_F = \alpha$
  - Densité d'état : nombre d'état dans  $[E, E+\delta E]$ , Burdettp33  
(optionnel mais fait lien avec la suite : Et si plus d'orbitales ?)
  - Cas du Li, on doit prendre en compte aussi les 2p)
- (Si élément imposé : Distorsion de Peierls cours M.Vérot)

## II. Propriétés de conduction

### A. Notion de masse effective

- Analogie entre GEL et Bloch
- On identifie les 2 modèles en considérant une masse effective :  $m^* = -\hbar^2/2\beta a^2$
- Interprétation avec  $\beta$ , plus  $m^*$  est faible, plus la conductivité est bonne
- Tableau de comparaison conductivité  
(optionnel : lien avec la conductivité et le modèle de Drude)

### B. Différents types de conducteurs

- Evolution dans la colonne 14 : C isolant, Si et GE semi-conducteur, Sn Conducteur Huheey p272, Marucco p170
- Décroissance de la conduction avec la valeur du gap, explication
- Définition et critère : conducteur, semiconducteur, isolant

### **C. Evolution de la conduction dans les métaux**

Les bandes s, p, d sont proches en énergie → recouvrement important

Diagramme pour différents cas : K, Ca, Ti, Cu + valeur de  $\sigma$ , Cours Tanguy,  
[https://en.wikibooks.org/wiki/Introduction\\_to\\_Inorganic\\_Chemistry/Metals\\_and\\_Alloys:\\_Structure,\\_Bonding,\\_Electronic\\_and\\_Magnetic\\_Properties#/media/File:D-band\\_filling.png](https://en.wikibooks.org/wiki/Introduction_to_Inorganic_Chemistry/Metals_and_Alloys:_Structure,_Bonding,_Electronic_and_Magnetic_Properties#/media/File:D-band_filling.png)

### **Conclusion**

Analogie molécule/Solide Tableau cours M.Vérot

**Ouverture** : Utilisation d'agent dopant et influence sur la conductivité, propriété optique, cours Tanguy

### **Si élément imposé dopage :**

Calcul projeter dans la partie I pour aller plus vite

#### **I. Construction d'un diagramme de bande**

##### **A. Orbitales cristallines**

##### **B. Énergie des orbitales**

#### **II. Propriétés de conduction**

##### **A. Notion de masse effective**

##### **B. Différents types de conducteurs**

##### **C. Dopage de semiconducteur**

Cours Tanguy

Jonction PN : <https://www.youtube.com/watch?v=JBtEckh3L9Q>