

Theorie des bandes

* Dans ce modele on regarde les interactions entre orbitales atomiques au sein du metal. (c'est M. Verdet)

$$* |\psi_k\rangle = A \sum_{n=1}^N e^{ikna} |\psi_n\rangle \quad (\text{cf "Methode Hückel" simple})$$

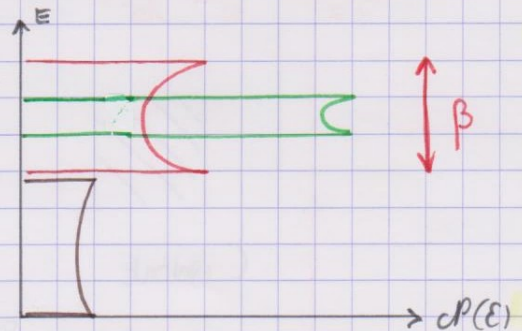
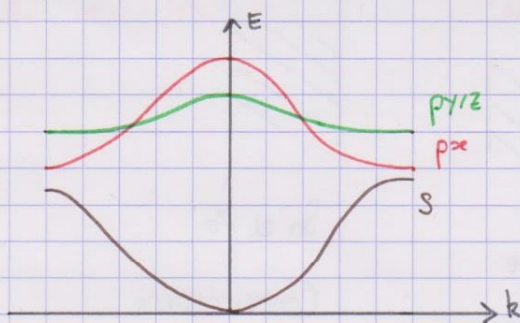
$$\Rightarrow \langle \psi_k | H | \psi_k \rangle = \epsilon_k = \alpha + 2\beta \cos(ka)$$

* Comme on a un grand nombre d'atomes k prend un nombre continu de valeurs

• $k=0$



• $k = \pm \frac{\pi}{a}$



↳ cf "Energies orbitales, bandes" = "Energie vers bande"

⇒ On obtient une structure de bande par chaque groupement d'orbitales

* Quand on trace les bandes pour les electrons de valence on obtient la caracteristique metal ou isolant d'un materiau

↳ cf "Metallux" : "Isolant et semi-conducteur"

* Pour avoir de la conductivité il faut que les électrons puissent se déplacer

↳ il faut E_F au milieu d'une bande

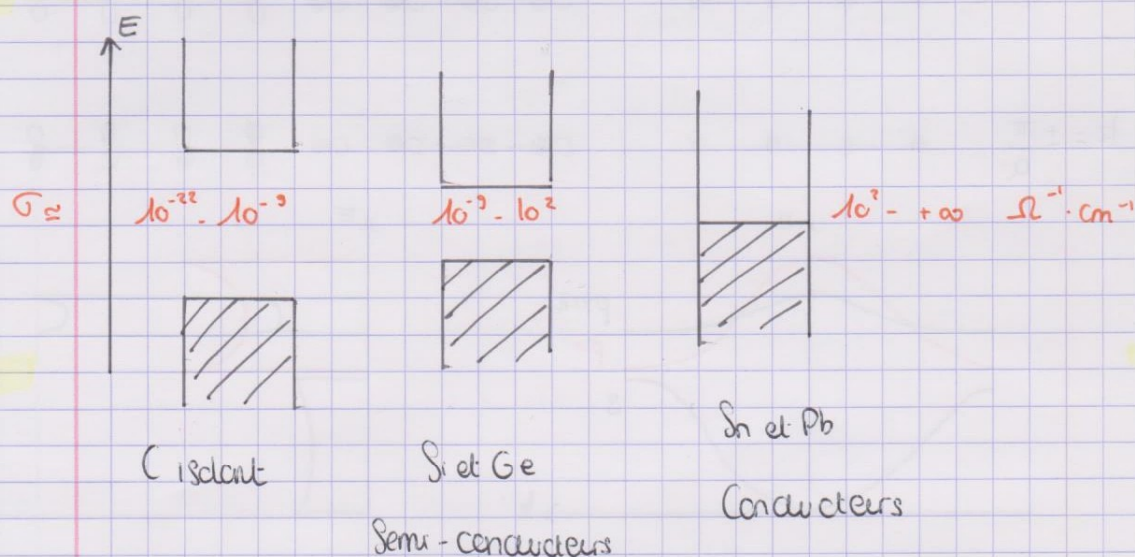
↳ on définit la bande de conduction et celle de valence.

* On peut interpréter l'évolution du caractère métallique dans le tableau périodique

↳ il faut avoir en tête que NON $\rightarrow$ NON

• Quand on descend dans le tableau il y a moins de recouvrement

↳ E_{stab} et E_{destab} diminuent



* Par aller plus loin et voir les concepts de masse effective

• Par interpréter l'évolution de la conductivité des métaux

• Par " " la couleur de Cu, Ag et Au

↳ cf "LC13 - Chimie du solide"

↳ cf "Evolution conductivité métaux"