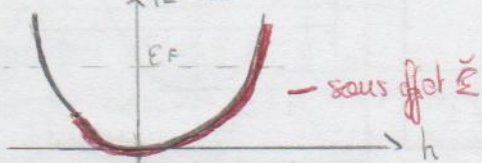




$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0 \\ \psi\left(\frac{l}{2}\right) = \psi\left(-\frac{l}{2}\right) \\ \psi'\left(\frac{l}{2}\right) = \psi'\left(-\frac{l}{2}\right) \end{array} \right\} \text{cond. de Born-Von Karman}$$

$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{l}} \exp[ikx]$; $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$; $\frac{\hbar k}{2} = p \equiv \pi$



relat° de dispersion

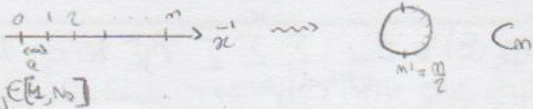
1) q_e par E . $2 e^- p/k$ et $2k/E$.

lien avec conductivité \rightarrow action champ \vec{E}'

$\vec{p}(\vec{k}) = -e \vec{E}' \tau = \hbar \vec{k}'$ transition d'énergie des $e^- \rightarrow$ conduct°

Em 3D $\psi = \left(\frac{1}{\sqrt{L}}\right)^3 \exp[i\vec{k}' \cdot \vec{r}']$; $E = \frac{\hbar^2 |\vec{k}'|^2}{2m_e}$

Modelle tight-binding



$\psi_k = \sum_{m=-m_1}^{m_1} \exp\left[\frac{i2\pi \ell m a}{na}\right] \phi_{j,m} = \sum_m e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} \phi_{j,m}$

Fct° de Bloch.

= orbitales de sym base d'un RI.

Construct°

$\psi_{k,j}(\vec{r}') = \sum_{\vec{j}} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} \varphi_j(\vec{r}')$ OB associée à φ_j

Fct propres de \mathcal{H} . constitutif

$$\Psi_{\vec{k}} = \sum_j c_j(\vec{k}) \Psi_{\vec{k}_j} \quad \text{vp de } \mathcal{H}$$

↳ donne $|\mathcal{H}(\vec{k}') - \mathcal{E}(\vec{k}') S(\vec{k}')| = 0$

$\Psi_{\vec{k}}$ orbitales cristallines.

Illustrations avec

(Nm en cours @ 1.2)

Points spécifiques :
 $\vec{k}' / \exp(i\vec{k}\cdot\vec{m}) \in \mathbb{R}$.

→ $\frac{\pi}{a}$, point Z

0, point Γ . qualit

Rappels Nüchel sur (Nm)

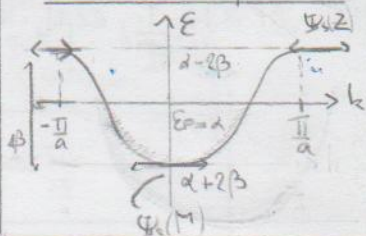
hypothèses

$$\langle 1s_m | 1s_{m'} \rangle = \delta_{mm'}$$

et

$$\langle 1s_m | \mathcal{H} | 1s_{m'} \rangle = \begin{cases} \alpha & \text{si } m = m' \\ \beta & \text{si } |m - m'| = 1 \end{cases}$$

$$\mathcal{E}(\vec{k}) = \alpha + 2\beta \cos(ka)$$



Fonction $\Phi_{\vec{k}} = \frac{\Psi_0(\vec{k}) \pm \Psi_0(-\vec{k})}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2m}} \sum_{\vec{m}} \cos(\vec{k}\cdot\vec{m}) 1s_{\vec{m}}$

Φ_1 Φ_2 em $k = \frac{\pi}{2a}$.

qualit.

Densité d'états mb de points $\vec{k} \in [\mathcal{E}, \mathcal{E} + d\mathcal{E}]$

(DOS) $D(\mathcal{E}) \propto \left\| \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \vec{k}} \right\|^{-1}$

out. th.

$$D(\mathcal{E}) = \frac{1}{-2\beta a \sin(ka)}$$

Densité d'état projetée : où et comment sont ces états ?

(PDOS)

$$D_{\vec{k}_j}(\mathcal{E}) = \frac{1}{N(\vec{k}')} \sum_{\vec{k}'} \sum_{i=1}^{N_0} \sum_{j=1}^{N_0} c_j^*(\vec{k}') c_j(\vec{k}') S_{ij}^{-1} \delta(\mathcal{E}_i - \mathcal{E})$$

mb pts \vec{k}' (sur tous les \vec{k}') (reciproquement) out. th.

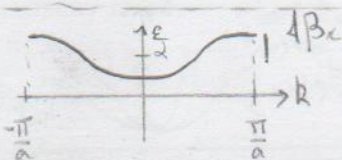
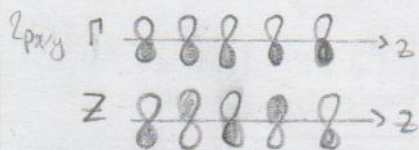
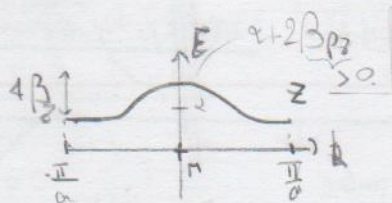
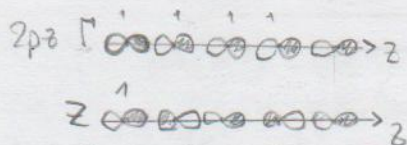
COOP curves : crystal overlap orbital population.

out. th.

$$COOP(\mathcal{E}) = \sum_{\vec{k}} \sum_{j=1}^{N_0} c_j^*(\vec{k}) c_j(\vec{k}) S_{jj}^{-1} \delta(\mathcal{E}_j - \mathcal{E})$$

A) aff. relative au point de départ (si même de p/OA, etc).

Peux d'autres orb. tales.

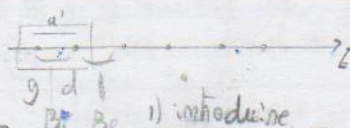
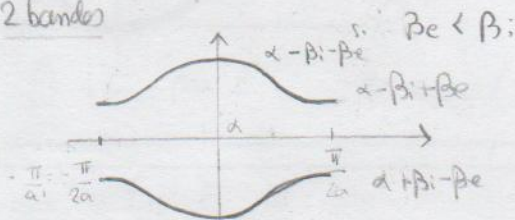


Fragmente H₂ et charmo (H₂)_m

2) H-ESL + Hückel

$$\rightarrow E = \alpha \pm \sqrt{\beta_1^2 + \beta_2^2 + 2\beta_1\beta_2 \cos(ka)}$$

2 bandes



1) introduire

$$\begin{cases} |Y_g\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum c_i |1s_{g,m}\rangle \\ |Y_d\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum c_i |1s_{d,m}\rangle \end{cases}$$




Rmq: (H₂)_m \rightarrow H_{2m}
 \equiv remplissage des bandes (ZB \neq)

3) Construction

$$\begin{cases} \psi^+(m) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|Y_g\rangle + |Y_d\rangle) \equiv \text{diagram} \rightarrow 2 \\ \psi^-(m) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|Y_g\rangle - |Y_d\rangle) \equiv \text{diagram} \rightarrow 2 \\ \psi^+(z) = \text{diagram} \rightarrow 6 \\ \psi^-(z) = \text{diagram} \rightarrow 6 \end{cases}$$

à partir des dipcharges de 1

Types de conduction.

- conducteur: E_F au milieu d'une bande; $\sigma \propto \rho(T)$; ϕ de gap. 
- semi-conducteur: σ faibles; $\sigma \propto \rho(T)$; gap $\ll 3eV$. 
- isolant: σ très faible; $(\sigma \propto \rho(T))$; gap important. 

Semi-conducteur: masse effective

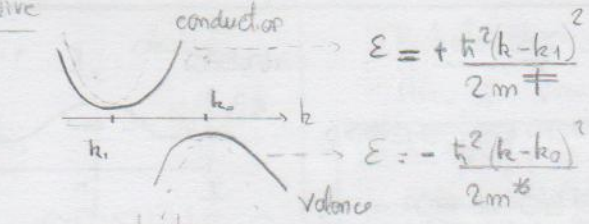
gaz e libres

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

$m^* > 0$ conduct positif

$m^* < 0$ — pas les trous

+ cond que e-libres



opposé hautement q.

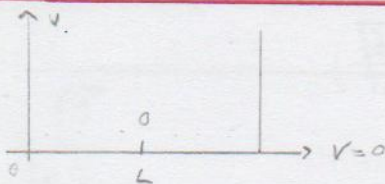
e-libres — $m^* > m^0$ moins cond que e-libres.

Type de gap

• gap direct E_{max}^v et E_{min}^c au même point $k_1^1 \rightarrow$ band vertical, $\Delta k^1 = 0$.

• — indirect E_{max}^v en k_1^1 et E_{min}^c en k_2^1 $k_1^1 \neq k_2^1$.

$\hookrightarrow \Rightarrow$ TUV pour les bandes en plus de la bande vertical.



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) = E \psi(x) \quad (ES)$$

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{k^2} \psi(x) = 0$$

$$\psi(x) = A_+ e^{ikx} + A_- e^{-ikx}$$



$$\psi\left(\frac{L}{2}\right) = \psi\left(-\frac{L}{2}\right) \quad (*) \text{ conditions de Born-Von Karman}$$

$$\psi\left(\frac{L}{2}\right) = \psi'\left(-\frac{L}{2}\right)$$

$$A_+ e^{i\frac{kL}{2}} + A_- e^{-i\frac{kL}{2}} = A_+ e^{-i\frac{kL}{2}} + A_- e^{i\frac{kL}{2}} \iff 2i \sin\left(\frac{kL}{2}\right) (A_+ - A_-) = 0$$

Donc $\frac{kL}{2} = p\pi, p \in \mathbb{N}$ et

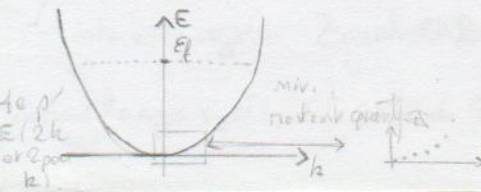
$$i k A_+ e^{i\frac{kL}{2}} - i k A_- e^{-i\frac{kL}{2}} = i k A_+ e^{-i\frac{kL}{2}} + i k A_- e^{i\frac{kL}{2}}$$

$$\iff 2i k \sin\left(\frac{kL}{2}\right) (A_+ + A_-) = 0 \quad k = \pm \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp[ikx]$$

Relation de dispersion

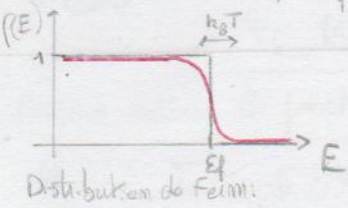
$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}, \quad E(k') = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m_e} \text{ avec } k' = \frac{k}{2\pi}$$



Niv. de Fermi : énergie de l'électron dans le HO des solides

$$E_f = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Sol: de: picinde on compte e/ct de T:



$$P(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{k_B T}\right)}$$

Lien avec la conductivité.

niveaux avec $k > 0$ et $k < 0$ peuplés symétriquement \rightarrow ϕ de mvlt d'ensemble donc pas de conductivité.

Sous l'action d'un champ électrique: pfd $\frac{d\vec{p}}{dt} = -e\vec{E}$ (classiq.)

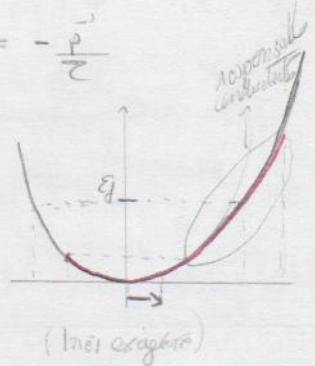
(Ou $\vec{p} = \hbar\vec{k}$)

$\vec{p}(t) = \vec{p}(0) - e\vec{E}t$
pas suffisant (Dirigens $\pm \infty$)

\rightarrow rajouter force de friction

$\vec{p}' = -\frac{\vec{p}}{\tau}$

$\frac{d\vec{p}}{dt} = -e\vec{E} - \frac{\vec{p}}{\tau} = \vec{0}$ (Régime stationnaire)
 $\vec{p}'(0) = -e\vec{E}\tau = \hbar\vec{k}'$
($t=0$)



\rightarrow transition d'ensemble des e \rightarrow conductivité. (cf TCand.)

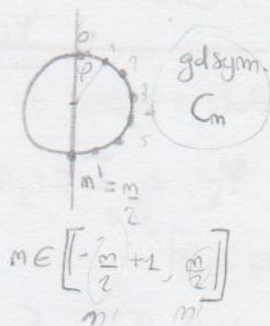
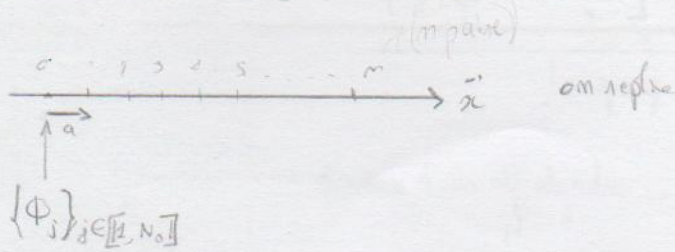
Généralisation à plusieurs dimensions.

$\Psi = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ et $E = \frac{\hbar^2 \|\vec{k}\|^2}{2m_e}$ pour sphère de Fermi.

Que peut-on mesurer dans tout ce qui précède!

- densité d'état DOS (density of state). $DOS(E) \propto \sqrt{E}$.
modèle semble valable pour les métaux formant des liaisons peu directionnelles.

Modèle tight-binding (liaison forte).



$$E = C_m^1 C_m^2 \dots C_m^{m'} C_m^{m'+1} = C_2 C_m^{-1} C_m^{-2} \dots C_m^{-m'+1}$$

$$\Gamma_\ell = \left(1 \exp\left(\frac{2\pi i \ell}{m}\right) \exp\left(\frac{4\pi i \ell}{m}\right) \dots \exp\left(\frac{(m-1) 2\pi i \ell}{m}\right) (-1)^\ell \dots \right)$$

$$\{\Phi_j\} = \left(\circ \circ \circ \dots \circ \dots \circ \dots \circ \right)$$

$$\Phi_{j_0} \Phi_{j_1} \Phi_{j_2} \dots \Phi_{j_m} \Phi_{j_{m'}}$$

$$a_{pp} = \frac{1}{m} \cdot m \cdot 1 = 1 \text{ donc}$$

$$\{\Phi_j\} = \sum_{\ell=-m'+1}^{m'} \Gamma_\ell$$

decomp. en RI.

Th. de projection:

$$\Psi_{\Gamma_\ell} = \sum \exp\left(\frac{i 2\pi \ell m}{m}\right) \Phi_{j,m}$$

orbitales de sym. du cristal.

$$\Psi_k = \sum_{m=-m'+1}^{m'} \exp\left(\frac{i 2\pi \ell \cdot m a}{m a}\right) \Phi_{j,m} = \sum_m e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}_i} \Phi_{j,m}$$

Fonctions de Bloch.

Fonctions de Bloch = orbitales de sym. base d'un RI.

$$\langle \Psi_k | \Psi_{k'} \rangle = \delta_{kk'}$$

$$k \in \left] -\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \right] \quad (\ell \in [-m'+1, m'])$$

Ces intervalles appellés Zone de Brillouin.

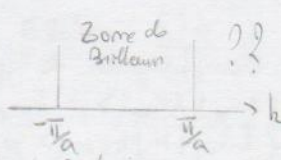


schéma de la zone régulière de la zone de Brillouin et du 1^{er} réseau réciproque.

Rappel: construction des orbitales de symétrie « orbitales de Bloch »

$$\Psi_{\vec{k};j}(\vec{r}) = \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \varphi_j(\vec{r})$$

Reste à construire les fonctions propres!



$$\Psi_{\vec{k};i} = \sum_j c_{ij}(\vec{k}) \varphi_{\vec{k};j} \quad \text{orbitale de Bloch associée à } \varphi_j$$

vp de \mathcal{H}

$$H \Psi_{\vec{k};i} = \epsilon \Psi_{\vec{k};i}$$

$(\langle \varphi_j | \cdot \rangle)$ $N_a = n_b$ orbitales par maille.

$$\sum_{j=1}^{N_a} c_{ij} H_{jj'} = \epsilon \sum_{j=1}^{N_a} c_{ij} S_{jj'}$$

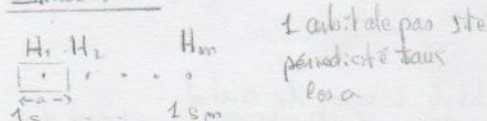
$$(H_{ij} - \epsilon S_{ij}) = 0$$

analogues orbitales moléculaires

$\Psi_{\vec{k};i}$ vp de l'hamiltonien - orbitale « cristalline »

Pour chaque \vec{k} , autant d'orbitales cristallines que d'orbitales localisées.

Illustration sur H_m (chaque infime de H).



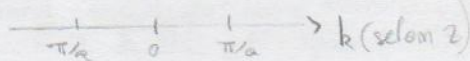
facteur de phase selon points particuliers

$k = \frac{\pi}{a}$ appelé point Z (X si selon α etc.)

et $|k=0|$ appelé point Γ

$$\Psi_s(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{m}} \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} 1s_{\vec{r}}$$

ou cas particuliers
 $\Gamma \quad k=0 = 1/m$
 $Z \quad k=\frac{\pi}{a} = 0/1$



On regarde donc

$$\Psi_s(\Gamma) \quad \circ \circ \circ \circ \circ \circ \circ \circ$$

$$\Psi_s(Z) \quad \circ \oplus \oplus \oplus \oplus \oplus \oplus \oplus \oplus$$

Énergie dans l'approx. de type Hückel.

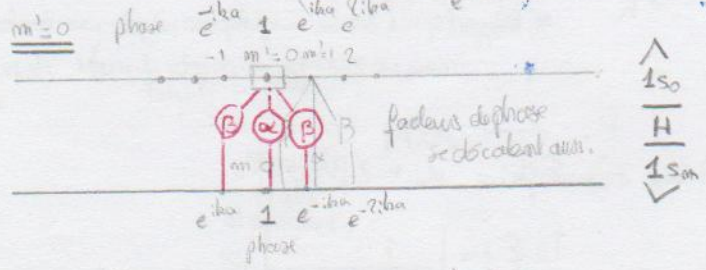
$$\text{typ } \begin{cases} \langle 1s_m | 1s_{m'} \rangle = \delta_{m,m'} \\ \langle 1s_m | H | 1s_{m'} \rangle = \alpha \text{ si } m=m' \text{ et } \beta \text{ si } |m-m'|=1. \end{cases}$$

Calculer $\epsilon(\vec{k})$

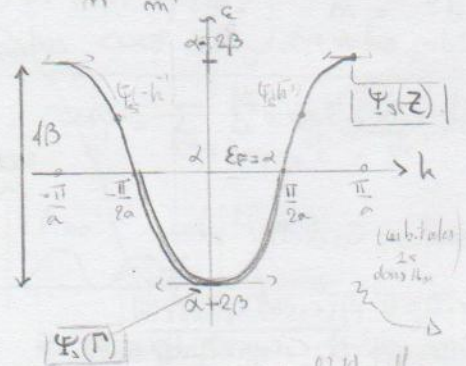
$$\epsilon(k') = \frac{\langle \Psi_s(k') | H | \Psi_s(k') \rangle}{\langle \Psi_s(k') | \Psi_s(k') \rangle}$$

$$\langle \Psi_s(k') | \Psi_s(k') \rangle = \frac{1}{m} \sum_m \sum_{m'} e^{-ik'ma} e^{ik'm'a} \underbrace{\langle 1s_m | 1s_{m'} \rangle}_{\delta_{mm'}} = \frac{1}{m} \cdot m = 1$$

$$\langle \Psi_s(k') | H | \Psi_s(k') \rangle = \frac{1}{m} \sum_m \sum_{m'} e^{-ik'ma} e^{ik'm'a} \langle 1s_m | H | 1s_{m'} \rangle$$



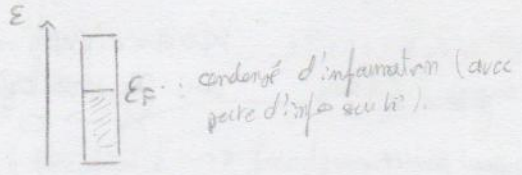
$$= \frac{1}{m} \sum_{m'} \alpha + \beta (e^{ika} + e^{-ika}) = \alpha + 2\beta \cos(ka)$$



Niveau de Fermi ?
moitié des niveaux (seront)

Bande plate, peu d'interact° (4*beta ~ 0)

indigeuse selon k.



$\Psi_s(k)$ et $\Psi_s(k')$ sont \hat{v} de l'Houllomon
on constant

$$\Psi_s(k) = \frac{\Psi_s(k) + \Psi_s(-k)}{\sqrt{2}}$$

$$\Phi_1(k) = \frac{1}{\sqrt{2m}} \sum_m e^{-ikma} + e^{ikma} = \frac{1}{\sqrt{2m}} \sum_m 2 \cos(kma) 1s_m$$

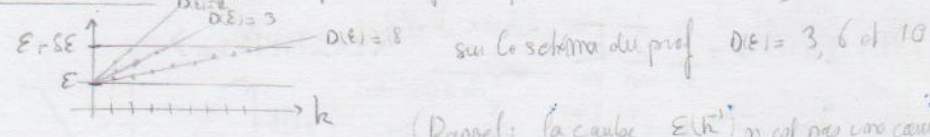
$$\Phi_2(k) = \frac{\Psi_s(k) - \Psi_s(-k)}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2m}} \sum_m 2 i \sin(kma) 1s_m$$

l'opposée. périodicité $> a$.

$k = \frac{\pi}{2a}$
 phase en cos $\Phi_1(k = \frac{\pi}{2a})$

$E = \alpha$
 non variant $\Phi_2(k = \frac{\pi}{2a})$
 oscillations limitées

Densité d'état. mb de pts k' pour lesquels $E(k') \in [E, E + \Delta E]$

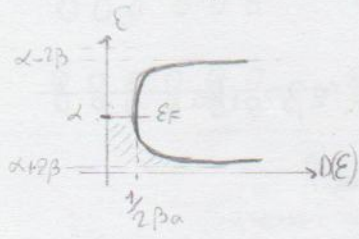


(Rappel: la courbe $E(k')$ n'est pas une courbe continue, mais un ensemble de points discrets)

$$D(E) \propto \left| \frac{\partial E}{\partial k} \right|^{-1}$$

Pour la chaîne infinie (1D)

$$E(k) = \alpha + 2\beta \cos(ka)$$



$$D(E) = \left| \frac{1}{-2\beta a \sin(ka)} \right|$$

$$\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} D(E') dE' = M \quad (1 \text{ mb par site})$$

$$\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} D(E) dE = \frac{N}{2} \rightarrow \text{mb } e^-$$

Densité d'état projetée sur et comment sont localisés les états?

$\Psi_j = c_1 \chi_1 + c_2 \chi_2$
 Découpage "1/2 ballroom"

$$\|\Psi_j\|^2 = c_1^2 \|\chi_1\|^2 + c_2^2 \|\chi_2\|^2 + 2c_1 c_2 \|\chi_1\| \|\chi_2\| \cos(\theta)$$

sur $\chi_1 \rightarrow c_1^2 \|\chi_1\|^2 + c_1 c_2 \|\chi_1\| \|\chi_2\|$
 $\chi_2 \rightarrow c_2^2 \|\chi_2\|^2 + c_1 c_2 \|\chi_1\| \|\chi_2\|$

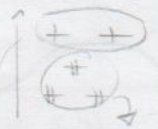
On peut partitionner.

ici, PDOS (Proj. Density of States) $\equiv \boxed{E}$

$$D_{\text{proj}}(E) = \frac{1}{N(k)} \sum_k \sum_{i=1}^{N_c} \sum_{j=1}^{N_o} C_{ji}^* (k) C_{ji}(k) S_{ij}^{-1} S(E; -E)$$

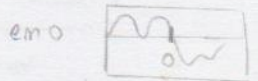
mb de points k' sur les points k' décomposition

Exemple du nickelacéte
s'adsorbant sur
du cuivre



on projette la DOS sur \neq gpes
d'orbitales

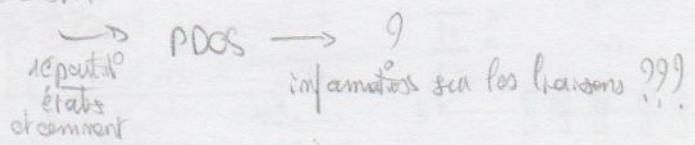
ex pics de PDOS $N_i(d_{xy} + d_{yz} + d_{xz}, yz)$ avant mu. de Fermi, donc remplies
pics de PDOS $(d_{xy} + d_{yz})$ montrant que e^- remplissent d_{xz} et d_{yz}
et niveaux vides non remplis au après mu. de Fermi



Nickel garde cette config^o en s'adsorbant?
D'après PDOS, ou:

« comment sans fortes
interactions le magnétisme
dans le calcul?
- Jochen »

Raisonnement: très compliqué dans l'espace des k
nb états ρ densité d'état
et au

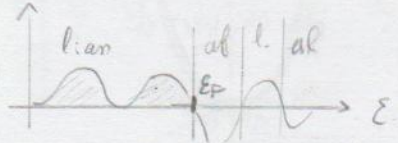


Analyse de la densité d'état et indice de liaison.

Pourrait à se demander le signe de ce terme. 2 analogues

Courbes COOP (Crystal Overlap Orbital Population)

$$COOP_{ij} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_i^{M_i} C_{j,i}^*(\mathbf{k}) C_{i,j}(\mathbf{k}) S_{ij} S(\mathbf{k}; -\mathbf{k})$$



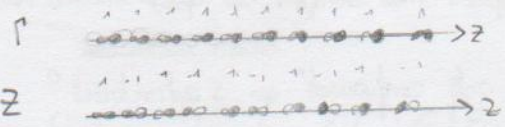
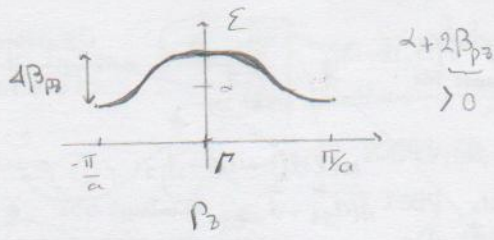
ici on ne compte que des niveaux liants.
impairment.

light binding

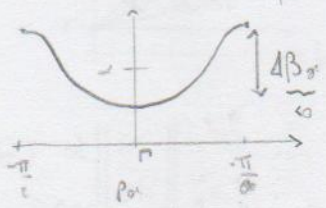
S: point de départ du calcul est OR (localisé) \rightarrow facile
S: est onde plane \rightarrow compliqué de recaler
 \Rightarrow logiciel utilis.

simple d'usage

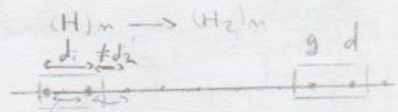
Passe d'autres orbitales.



« Quand j'arrive sur la chaîne, que est le facteur de phase ? »



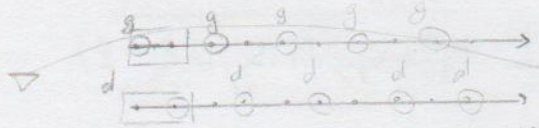
Maintenant, au lieu de regarder $(H_1)_m$, on regarde $(H_2)_m$ (principe de dualité pour mélange des orbitales de Bloch pour diagonaliser le H).



$a' = 2a$
 $\beta_1 \quad \beta_2$
 (distances totales de $2a$ entre H_1)

$$\begin{cases} |\psi_g\rangle = \frac{1}{\sqrt{m}} \sum e^{ikx} |s_{m,g}\rangle \\ |\psi_d\rangle = \frac{1}{\sqrt{m}} \sum e^{ikx} |s_{m,d}\rangle \end{cases}$$

$\Delta \phi = \vec{v} \cdot \vec{p}$ de H

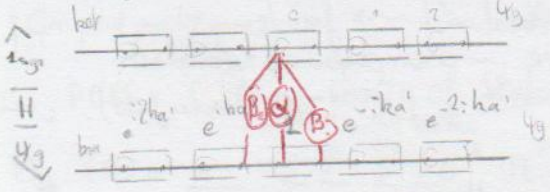


donc à combiner pour diagonaliser.

Req. $\langle \psi_g | \psi_d \rangle = 0$.

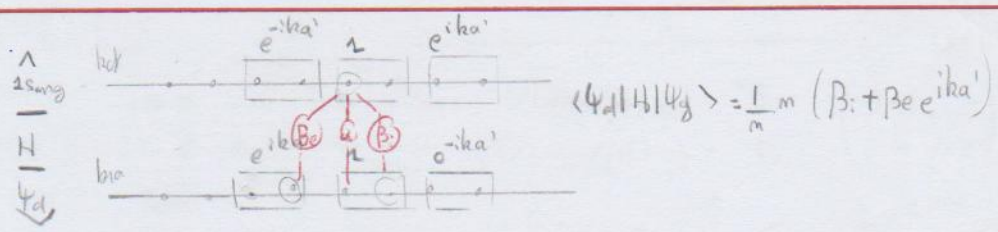
$\langle \psi_g | H | \psi_g \rangle = E \langle \psi_g | H | \psi_g \rangle$

$\langle \psi_d | H | \psi_d \rangle = E \langle \psi_d | H | \psi_d \rangle$
 $e^{-2ika'} e^{-ika'} 1 e^{ika'} e^{2ika'}$



$\langle \psi_g | H | \psi_g \rangle = \frac{1}{m} \cdot m \alpha = \alpha$
 $\sum_m \sum_{m'} e^{ik(m-m')a'} |s_{m,m'}\rangle \langle s_{m,m'}|$

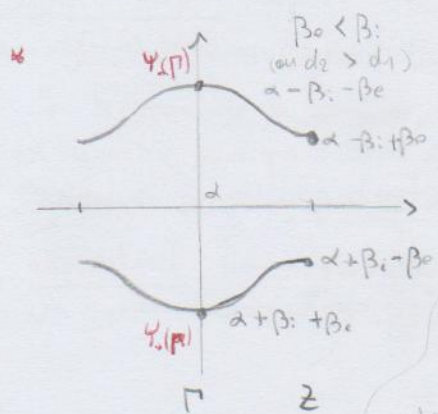
1) $\alpha_d = 0$



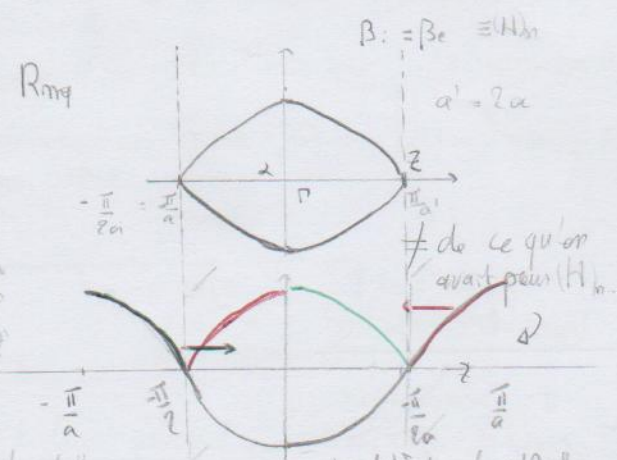
$$\rightarrow \begin{vmatrix} \alpha - \varepsilon & \beta_i + \beta_e e^{-ika'} \\ \beta_i + \beta_e e^{ika'} & \alpha - \varepsilon \end{vmatrix} = 0 = (\alpha - \varepsilon)^2 - (\beta_i + \beta_e e^{-ika'}) (\beta_i + \beta_e e^{ika'})$$

$$(\alpha - \varepsilon)^2 = \beta_i^2 + \beta_e^2 + 2\beta_i\beta_e \cos(ka')$$

donc
$$\varepsilon = \alpha \pm \sqrt{\beta_i^2 + \beta_e^2 + 2\beta_i\beta_e \cos(ka')}$$
 2 valeurs d'auj par chaq. k \rightarrow deux bandes.



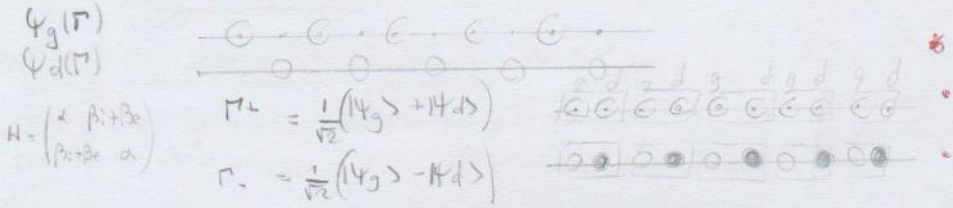
On part de 2 orb. de Bloch, on arrive à deux orbitales cristallines (α) (et deux bandes).



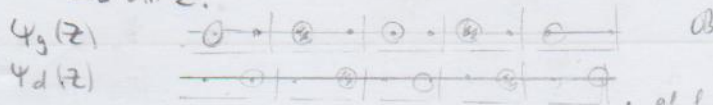
identité par translation

Dimensionner "seulement des structures de bande" par les justes car "bandes" et non replimont.

Allure des orbitales: \rightarrow en Γ .



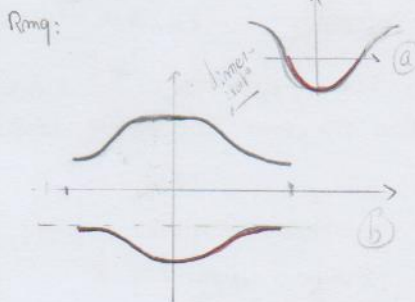
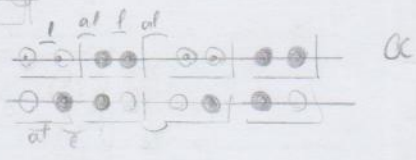
→ on a:



$$H = \begin{pmatrix} \alpha & \beta_i - \beta_r \\ \beta_i - \beta_r & \alpha \end{pmatrix}$$

$$Z^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_g + \Psi_d)$$

$$Z^- = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_g - \Psi_d)$$



1 bande remplie favorable énergie: moment d'ordre $\beta_e \neq \beta_i$.
 ↳ la forme dimensionnée est favorable.

le fait d'avoir une distorsion favorable = distorsion de Poisson.
 (~ effet Jahn-Teller pour les molécules)

Si le niveau de Fermi se situe au milieu d'une bande (coupe une bande), le composé est conducteur. ($(H)_m$ est positif conducteur).
 La distorsion induit une transition de phase métallique → semi-conducteur

Remplissage à $\frac{1}{2}$ → dimension 1/2

Remplissage à $\frac{p}{p}$ → dimension 1

Remplissage à $\frac{1}{3}$ → dimension 1/3



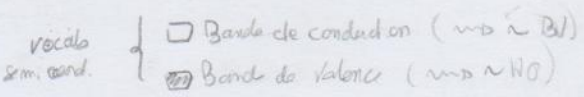
Types de conduction



σ conductivité.

ET évolution $\sigma(T)$

- conducteurs: σ élevé; $\sigma \uparrow$ qd $T \uparrow$, pas de gap. (E_F coupe au moins une bande)
- semi-conducteurs: σ faible; $\sigma \uparrow$ qd $T \uparrow$; gap < 3 eV.
- isolants: σ très faible; gap > 3 eV. ($\sigma \uparrow$ qd $T \uparrow$ mais reste faible).



Semi cond: mesure effective.

↳ masse qu'aurait un e⁻ pour observer une conductivité donnée.

gaz
e⁻ p. blo. $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$

pour un sem. cond

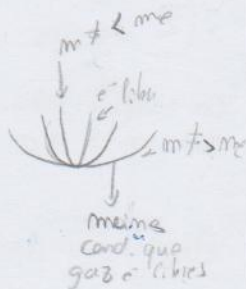
$E = \frac{\hbar^2 (k-k_0)^2}{2m^*}$

$E = \frac{\hbar^2 (k-k_0)^2}{2m^*}$

Pour la bande de valence, $-m^*$
 Pour la bande de conduction, $+m^*$) en se référant au gaz e⁻ libres.

$m^* < 0$ conduction par des trous
 $m^* > 0$ conduction par e⁻

$\frac{m^*}{m_0}$ au $\frac{m^*}{m_0}$

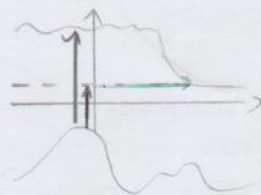
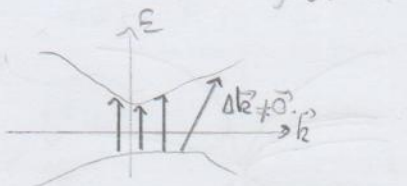


Types de gap.

↳ règle de sélection de transition $\Delta \vec{k} = \vec{0}$.

Si k' max de la bande de valence est au même point que le min de la bande de conduction \rightarrow gap direct.

gap indirect \leftarrow même règle de sélection mais on a ici un couplage avec phonons (JNV) (couplage vibration)



\rightarrow levée de l'indirect \uparrow transition verticale (perte élec)

(perte vibrationnelle)

Evalué de la conductance dans le tableau p.e.s.d.g

à partir de la \sim ven avec la pente de Hall.

\rightarrow La conduct° est fortement liée à la carrier (?)

\rightarrow plus une bande est large \oplus la caractere conducteur est important

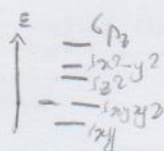
↳ largeur $s \gg p$ d. l \leftarrow densité d'état.

Analyse d'une chaîne unidimensionnelle

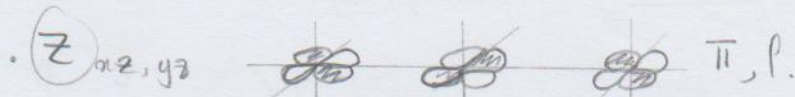
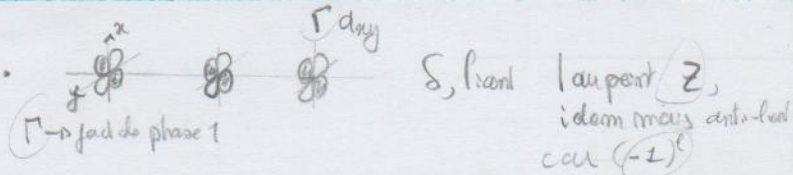
chaîne Pt ss brome : chaîne isolée
 chaîne Pt avec brome : \rightarrow décalée

Car le fragment

$\left[\begin{matrix} u_{n+1} & p_{n+1} & m_{n+1} \\ u_n & p_n & m_n \end{matrix} \right]^2$



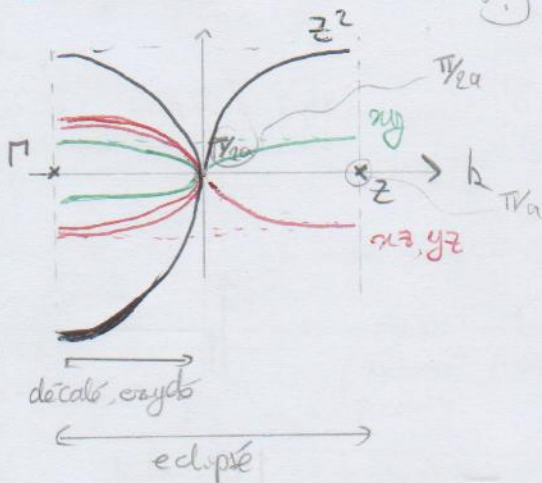
par rapport fig 5.3.



On neplit tout jusqu'à a, g (niv. de Fermi)
car on a $\delta e \rightarrow$ on ne trace le circuit. semic.

Par le composé dopé

Bz structure cristalline il
vient juste oxyder et enlever e^- .



On neplit car on augmente
le paramètre de maille
(*) 2 comme précédemment
 $(H)_n \rightarrow (H)_m$

Structure 2D .. Il y a des caractéristiques de découpage de la ZB 2D.
2B des uns direct et 2B des autres \Rightarrow 4B \Rightarrow bas en xy, z

Transition métal s-e (fig 5.12)

En $\nearrow P$, on \nearrow le rapprochement car atomes \oplus proches : on allonge les bandes
en $\nearrow P \Rightarrow$ on va avoir un croisement de bande. Seulement, c'est un croisement
hyperbolique. Car on a un mélange de bandes peu liées le croisement.

Zone de Brillouin 3D : voir Diapo/poly.