

CHIMIE DU SOLIDE.

④

Structure électronique des solides

→ Modèle du gaz électronique libre

Chaîne de Na solide ○—○—○—○

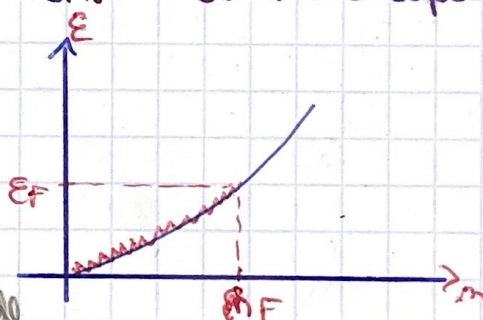
On a
$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m E}{\hbar^2} \psi(x) = 0$$

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

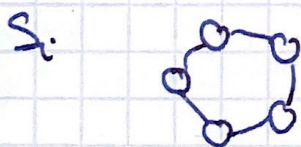
Niveau de Fermi: dernier état occupé:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{\pi}{2a} \right|^2$$

→ paramètre de maille



Écart énergétique: $\Delta E \propto 1/L$
plus $L \rightarrow$, plus états proches.

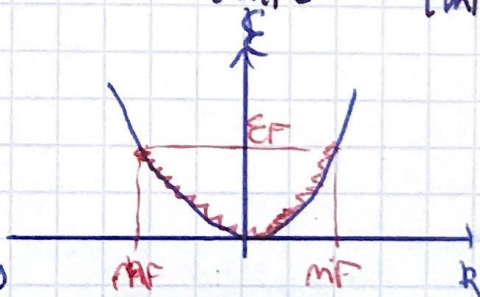


$\psi(x+L) = \psi(x)$ Périodique.

$\psi(x+L) = A e^{ik(x+L)} = \psi(x) e^{ikL} = \psi(x)$

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

$k = \frac{2\pi n}{L} \rightarrow 2 \text{ valeurs possibles}$



Des: Nbre d'état dans un intervalle d'énergie.

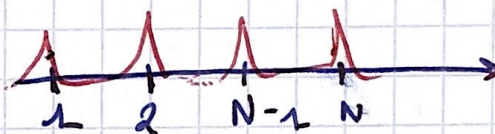
$$g(\varepsilon) = \frac{\partial N}{\partial \varepsilon} = \frac{\partial N}{\partial k} \frac{\partial k}{\partial \varepsilon}$$

$$\Rightarrow g(\varepsilon) \propto \varepsilon^{1/2}$$

Densité d'état.

→ Modèle des électrons libres.

Soit une chaîne avec
linéaire d'atome M .



$$\Psi(x) = A \sum_{m=1}^N C_m \varphi_m(x)$$

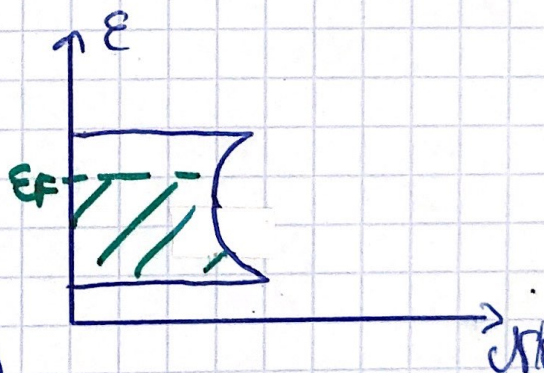
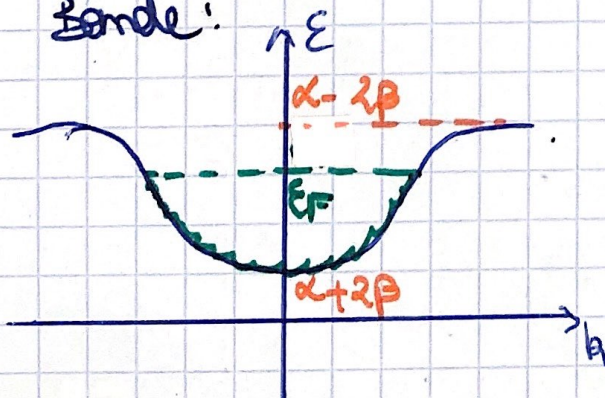
$$\Rightarrow \Psi_k(x) = A \sum_{m=1}^N e^{ikma} \varphi(x-ma)$$

si $k \in [-\pi/a, \pi/a] \Rightarrow$ 1^{ère} zone de Brillouin

Énergie associée :

$$\varepsilon_k = \alpha + 2\beta \cos(ka)$$

Structure de
Bande :



CHIMIE DU SOLIDE.

5

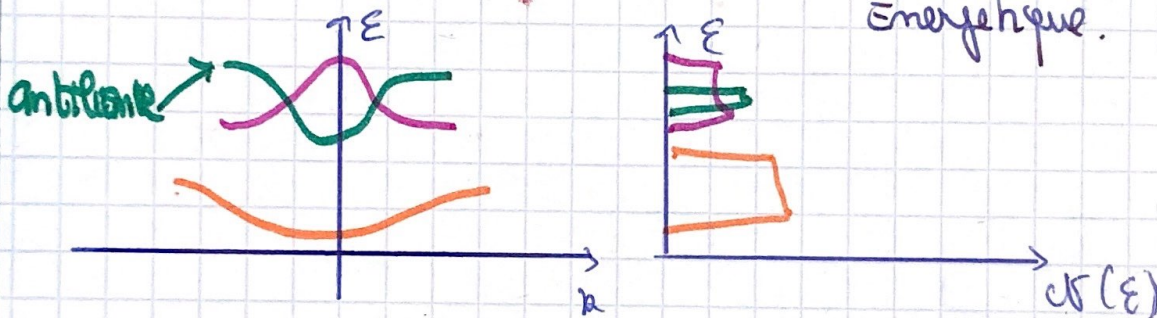
Structure des bandes

→ largeur des bande liée à $\beta \Rightarrow$ bandwidth

Ex: s, σ plus de recouvrement que p, π
donc $\beta_s > \beta_p$

↳ bande plus large.

→ hauteur des bande liée à $\alpha \Rightarrow$ niveau énergétique.



Propriétés des solides.

→ Concepte de masse effective. m^* .

• Si $m^* < m_e \rightarrow e^-$ léger.

↳ Bonne conductivité
↳ forte conductance.

• Si $m^* > m_e \rightarrow e^-$ lourd.

↳ Mauvaise conductivité
↳ Faible conductance.

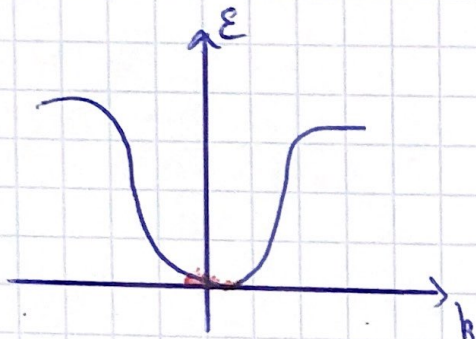
$$m^* \propto 1/\beta$$

$$m^* \downarrow \beta \uparrow$$

↳ conductance

↳ orbitales de valence

→ Cas de la bande faiblement remplie

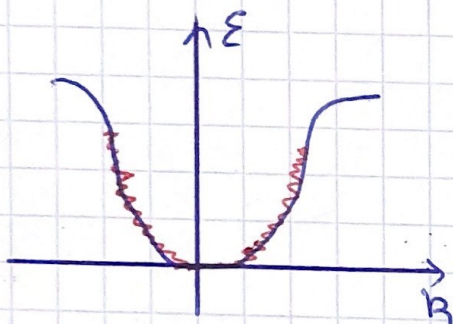


$$k = 0$$

$$m^* = - \frac{\hbar^2}{2\beta a^2}$$

$$m^* > 0$$

→ Bande presque pleine



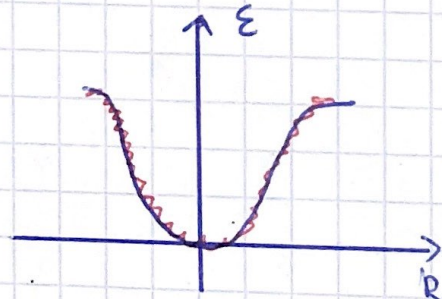
$$k = \pi/a$$

$$m^* = \hbar^2 / 2\beta a^2$$

$$m^* < 0$$

↳ Nouvelle particule : le trou h^+ : $q = +e$.
 $m^* > 0$

→ Bande pleine



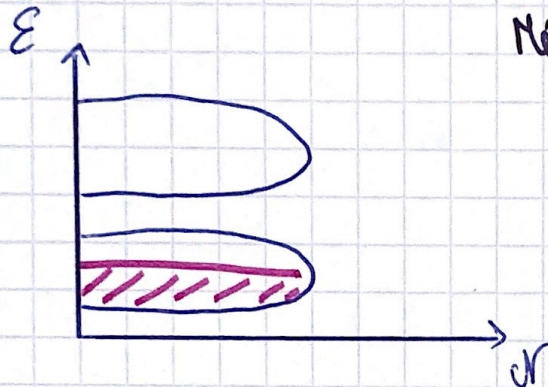
$$\delta \vec{U} = 0$$

$$\sigma = 0$$

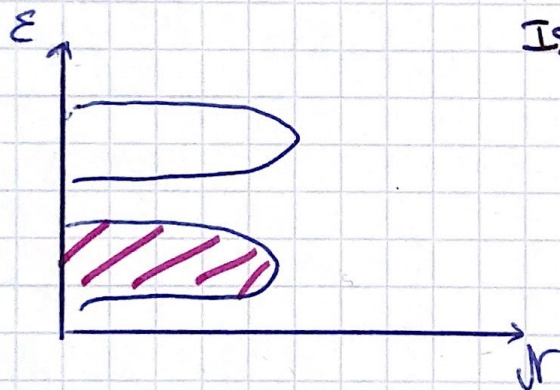
CHIMIE DU SOLIDE

⑥

→ différents solides.

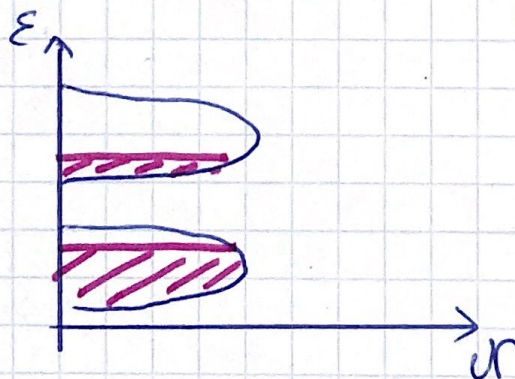


Métal ODG $\sigma > 10^2 \Omega^{-1} \text{m}^{-1}$



Isolant ODG

$10^{-22} \leq \sigma < 10^{-9} \Omega^{-1} \text{m}^{-1}$



Semi - Conducteur

ODG

$10^{-9} < \sigma < 10^2 \Omega^{-1} \text{m}^{-1}$

Niveau de Fermi ne coupe aucune bande
↳ ISOLANT.

Améliorer le σ .

Si on dope le BC : dopage n : e^- qui conduisent

Si on dope le BV : dopage p : h^+ qui conduisent

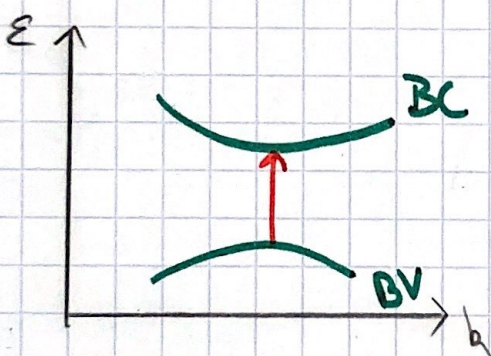
→ Propriétés optiques dans les solides.

- ϵ : le diélectrique :
- $\epsilon > 0$: propagation de la lumière
 - $\epsilon < 0$: Réflexion.

Absorption de la lumière

Isolant et SC peuvent absorber la lumière.

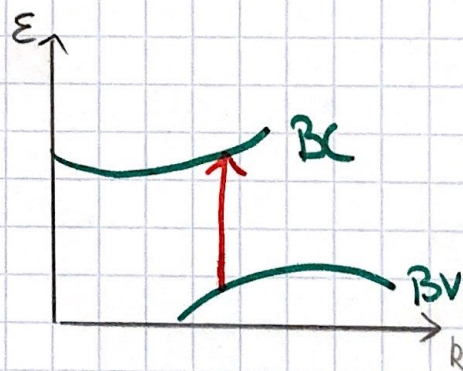
Règles de sélection: \vec{n} qui n'est pas nul.



Gap direct

$$E_{\text{photon}} = E_{\text{gap}}$$

abs

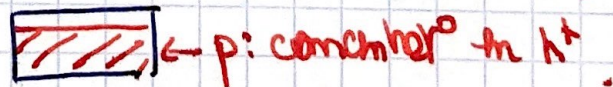
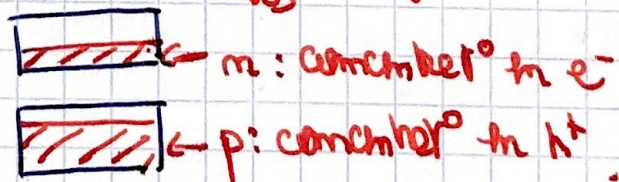


Gap indirect

$$E_{\text{photon}} > E_{\text{gap}}$$

abs

Physique du SC



- Dopage n: on substitue un atome par un élément de valence supérieur
 $\begin{array}{ccc} & \text{Si} & \\ & \downarrow & \\ & 5e^- & \end{array}$
- Dopage p: on substitue un atome de valence inférieur
 $\begin{array}{ccc} & \text{B} & \\ & \downarrow & \\ & 3e^- & \end{array}$