

L 11 Titre : Modèle des bandes

Présentée par : Leonardo Rico

Correcteur : Jean-François Olivier

Date : 02/04/2021

Compte-rendu leçon correcteur

Le compte-rendu est construit comme tel :

1. Rappels : introduction du sujet, des principaux éléments et définitions qui doivent être incluses dans la leçon,
2. Notions : rappel de toutes les notions découlant des principaux éléments introduits dans la leçon. Les exemples phares et expériences à avoir en tête pour aborder sereinement la leçon et la séance de question. Ce n'est pas une correction de la leçon, mais plutôt un *glossaire de schéma* et de *mots-clefs*.
3. Avis sur le plan proposé : comporte la *correction de la leçon*, c'est-à-dire une modification des exemples, de la structure, etc si cela semble nécessaire.
4. Discussion sur des *points spécifiques* de la leçon : le contenu de cette section est lié aux discussions réalisées avec les étudiants.

Rappels de définitions, concepts à aborder lors de la leçon :

Cette leçon peut sembler complexe aux premiers abords. Elle est en réalité, d'une extrême simplicité. Le concept de bande est à la fois largement bien documenté, vulgarisé mais aussi explique nombre et nombre de phénomène de la vie quotidienne.

De ce fait, vous, futurs agrégés, vous êtes à même d'exploiter toutes ces ressources pour créer une leçon à la fois stimulante, passionnante et vibrante d'énergie. Commençons par quelques considérations sur les leçons de type modélisation.

• Généralités sur les leçons « modèle »

Les leçons autour de *modèle(s)* nécessitent que l'on asseoit son discours autour d'une observation expérimentale. L'enjeu est double. Il permet d'apporter du crédit à l'élaboration d'un modèle, de justifier les approximations et hypothèses réalisées en fonction des observations expérimentales. Tout ceci, ne revient qu'à élaborer une leçon suivant le raisonnement déductif :

Formulation du problème → modélisation & hypothèses → mise en pratique du modèle et interprétation des résultats.

Ces leçons doivent inclure : une construction du modèle (qualitative/quantitative) laquelle doit nécessairement être accompagnée d'une mise en application, si possible, permettant de justifier une observation initiale issue de l'expérience.

En fonction de vos affinités et de vos aisances respectives, c'est à vous de répartir votre temps d'avantage sur la construction du modèle ou sur l'application de celui-ci. De mon point de vu, un ratio 1:3 ou 1:4 en faveur des applications me semble le plus approprié, le jury étant le plus souvent moléculiste. Cela lui permettra de mieux suivre et d'amorcer une discussion plus intéressante avec lui.

• Construction de la leçon

Plusieurs difficultés sont immédiatement à prendre à compte lors de la création de ces leçons :

- *la contextualisation* : l'emploi d'un phénomène physique (conductivité électrique/thermique, capacité thermique, ...) est nécessaire pour asseoir son discours sur des faits expérimentaux. La conduction électrique permet de mettre l'accent sur certaines *technologies* (*diode, transistor, varistor...*) dont les idées de base sont simplement explicables par le modèle des bandes. Ces technologies, basées sur les semi-conducteurs, permettent d'appuyer le discours sur des fait d'actualité de court terme comme la pénurie de semi-conducteur dans de nombreux secteurs industriels comme l'automobile, mais aussi sur l'un des grands enjeux de notre siècle qu'est la transition écologique.

Tout ceci n'est bien entendu pas le cadre de la leçon, mais permet de lui donner importance et crédibilité auprès des étudiants/le jury dès les premières minutes.

- *la description théorique* : le modèle des bandes peut être construit de nombreuses façons différentes. Une construction thématique autour des semi-conducteurs fait appel à une description **liaison forte** s'appuyant sur une **approche** type **orbitales moléculaires**. Cette approche n'est pas la seule possible. Il faut avoir **quelques idées** sur les autres approches possibles.
- *le niveau de la leçon* : le jury sera composé de non spécialistes sur cette thématique, votre discours doit rester accessible à des moléculistes, tout en satisfaisant les éventuels spécialistes. Un niveau L2 est approprié et permet de s'appuyer les *orbitales moléculaires*, afin d'élaborer un modèle des bandes.

Je déconseille de vous lancer dans les approches à plusieurs dimensions, lesquelles font appel à des notions de cristallographie complexe et n'apporte pas grand chose du point de vu conceptuel.

Liste des notions :

Toutes les notions abordées ou en lien avec la leçon sont repertoriées ci-dessous. Certains sont développées partiellement dans la suite du rapport.

1. Conductivité électrique dans les solides
2. Théorie des OM : approche LCAO
3. Modèles de bandes
 1. Approche interaction forte – tight-binding : métaux du bloc d, non-métaux.
 2. Approche interaction faible – electron libre
4. Différence métal / semi-conducteur / isolant
5. Dopage N / P

Avis sur le plan proposé, choix des exemples :

Niveau : L2

Pré-requis:

- Champ cristallin
- Théorie des OM et Hückel
- Configuration électronique

I/ De l'atome au solide cristallin

1. Construction
2. Remplissage électronique

II/ Propriété des solides

1. Métaux
2. Semi-conducteurs
3. Dopage des semi-conducteurs

Les intitulés du plan sont appropriés et fournissent les éléments de discussions nécessaires pour votre leçon. Cependant, la leçon en l'état n'est pas exploitable à l'agrégation par l'absence d'introduction et de conclusion soignées, d'un fil rouge, et d'un réel objectif à l'exposé.

Une reformulation complète de la trame de cette leçon est inévitable. En voici une maquette possible à retravailler pour qu'elle respecte les conditions et temps du concours.

Pré-requis

- comportement des métaux décrits par la théorie de Drude ;
- théorie des orbitales moléculaires : construction, HO, BV ;
- tableau périodique et configuration électronique ;
- électrostatique élémentaire : condensateur électrique, champ électrique, conductivité électrique et mobilité électrique.

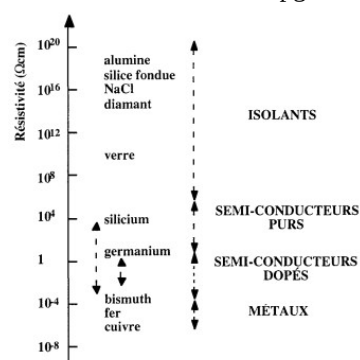
Introduction

- Conduction électrique et tableau périodique :



Coloration des éléments chimiques les plus conducteurs en vert [tiré de [tableau périodique dynamique](#)]

Classification en fonction de la résistivité [d'après cours de Boilot, Chimie du solide, pg 70]



pour avoir quelques ord :

<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/Tables/elecon.html#c1>

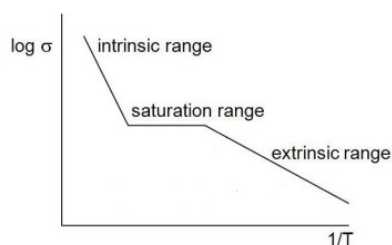
Sur un simple critère de résistivité, il est possible de définir des conducteurs et isolants à température ambiante

- $\rho < 10^{-4} \Omega \cdot m^{-1}$: métaux (ex : alcalins, alcalino-terreux, éléments du bloc d, ...).
- $\rho > 10^5 \Omega \cdot m^{-1}$: isolants (ex : carbone, phosphore, ...)

Autres : semi-conducteurs → très employés en électronique et constitue un enjeu commercial et technologique. Principaux éléments concernés sont des métalloïdes Germanium, Arsenic, Silicium, ... Dans le cas du Silicium, on a des applications dans les cellules solaires, la microélectronique [[De quoi faire une introduction sur le sujet ...](#)]

Semi-conducteurs présentent des propriétés de conduction assez spécifiques :

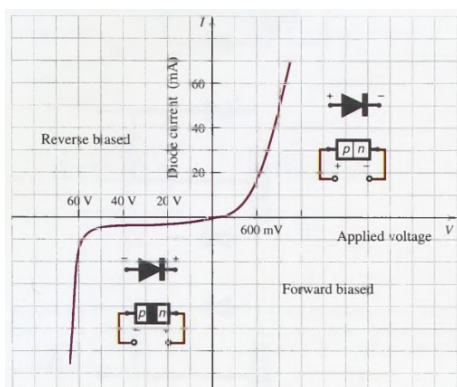
1. Conductivité en fonction de la température - régime intrinsèque, régime extrinsèque



Comportement conductif des semi-conducteurs extrinsèques.

→ Objectif : réaliser une analyse comparative dans le leçon afin de comprendre pourquoi la conductivité d'un semi-conducteur diffère de celle d'un métal.

2. Un chimiste va chercher à contrôler la conductivité des semi-conducteurs.



Caractéristique d'une diode [tiré de Physique, Hecht, Fig. 23.33]

→ Objectif : Expliquer la polarisation d'une diode.

Pour cela, on va construire un modèle : **un modèle des bandes**.

I/ Formulation d'un modèle quantique

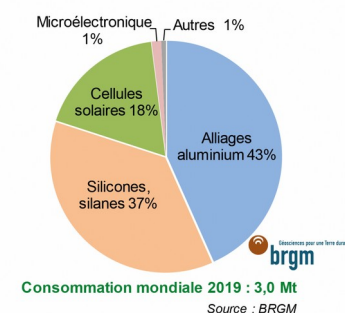
1. Hypothèses du modèle - construction des niveaux d'énergie

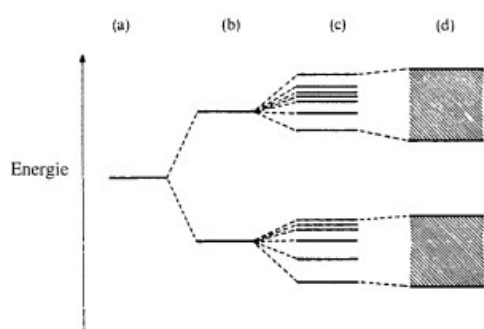
On s'intéresse au transport d'électron dans les solides. Ceci passe l'élaboration d'une modélisation simple :

- électrons → décrit par une base d'orbitale atomiques en y incluant uniquement les niveaux de valence,
- cristal → système périodique, on prend alors une chaîne infinie et circulaire [on néglige les effets de bords du cristal]

Prenons par exemple le Li [$1s^2 2s^1$] : on somme les orbitales 2s entre elles afin d'en construire le diagramme d'énergie

Usages du silicium métal en 2019





Effet de l'ajout progressifs d'atomes de Li

- a) 1 atome
- b) 2 atomes
- c) plusieurs atomes
- d) un solide

[d'après le cours de Boilot, Fig. 2, pg 69]

A force d'ajouter des orbitales atomiques, la différence d'énergie entre un niveau n et un niveau $n + 1$ devient commensurable à $k_B T$:

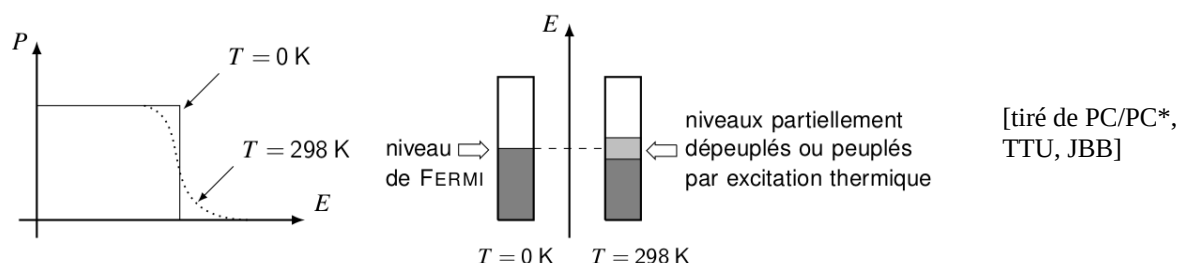
$$E_{n+1} - E_n < k_B T$$

Les niveaux d'énergie ne sont plus un ensemble discret mais bien un ensemble continu.

ex : proposer de faire en TD une application numérique en estimant l'ordre de grandeur entre deux niveaux.

2. Le remplissage des niveaux

La distribution de Fermi : donne la répartition des électrons en fonction de la température.



[tiré de PC/PC*,
TTU, JBB]

Niveau de Fermi : énergie du dernier niveau occupé à $0K$ → illustration par la fonction marche.

Energie de Fermi : à température non nulle, il s'agit du niveau où la probabilité d'occupation est de 1/2.

Intérêt : Possibilité de définir des bandes de conceptions / valence – définition par analogie aux HO/BV

Solides	Molécules
Bande de valence	HO
Bande de conduction	BV

→ Limite entre les deux domaines est donné par l'énergie de Fermi.

Pour illustrer tout ça : <https://toutestquantique.fr/metaux/>

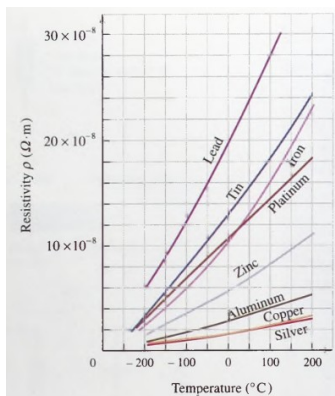
TRANSITION : A partir de ce formalisme, il va être possible d'étudier les matériaux entre le conducteur parfait où tous les électrons au niveau de Fermi peuvent conduire et l'isolant parfait, où aucun électron ne peut conduire le courant.

II/ Etude des comportements de conduction

Conductivité est expliqué par le nombre d'électron présents dans la bande de conduction, c'est-à-dire les électrons présents au-dessus du niveau de Fermi, lesquels sont les seuls thermiquement activés.

1. Comportement métallique

Rappel sur la conductivité des métaux :



Résistivité en fonction de la température de quelques métaux [d'après Physique, Hecht]

Interprétation avec le modèle des bandes : le nombre d'électron dans la bande de conduction augmente avec la température → d'avantage de porteur de charge → une plus grande conduction. On s'attend à avoir une augmentation de la conductivité avec la température.

On peut quantifier tout ça : <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/Solids/Fermi2.html#c1>

Dans la série alcalin, on peut facilement estimer le nombre de porteur de charge à 0 K :

Energie	Li	Na	K	Rb
Niveau de Fermi ϵ_F	4.74	3.24	2.12	1.85
Nombre d'électrons conducteurs $n [\cdot 10^{29} e^- \cdot m^{-3}]$	0.47	0.26	0.14	0.11

Il s'agit du nombre d'électrons conducteur au niveau de Fermi (les seuls qui vont conduire).

Limites du modèle : on rappelle que la conductivité est donnée par :

$$\sigma = n\mu e$$

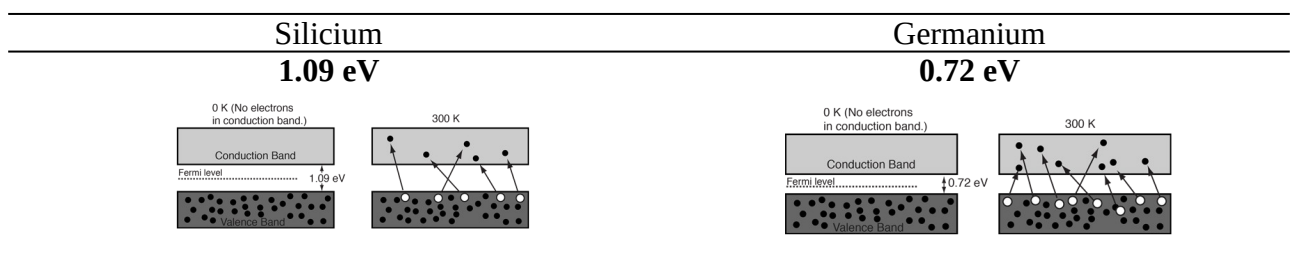
où n est le nombre de porteur de charge et μ la mobilité électrique des électrons, e la charge élémentaire.

Le modèle ne décrit pas bien la conductivité des métaux à cause de l'absence de description des vibrations du cristal qui vont se coupler au transport d'électron, l'agitation (diffusion thermique) des électrons dont l'amplitude augmente avec la température, la présence d'impureté (rappel pour vous : la loi de Matthiessen).

L'augmentation de la température a pour effet de diminuer d'avantage la mobilité par rapport à la concentration en porteur de charge.

2. Comportement isolants / semi-conducteur intrinsèques

Comparaisons du nombre de porteur de charge activé en fonction de la température entre deux semi-conducteurs intrinsèques :

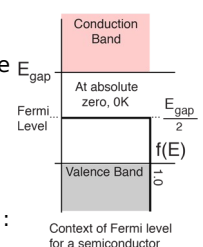


Ref : <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/Solids/band.html#c1>

On peut essayer de faire une application numérique rapide avec la distribution de Fermi pour estimer le nombre de porteur de charge associé aux deux semi conducteurs :

$$\epsilon - \epsilon_F \sim \epsilon_G/2$$

On peut employer un calculateur intégré sinon calculette avec la loi de Fermi pour avoir des ODG : <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/Solids/Fermi.html#c4>



Element	Eg (eV)	$\rho (\Omega \cdot m)$	$n (e^- \cdot m^{-3})$
Si	1.09	$\sim 10^3$	$1.26 \cdot 10^{16}$
Ge	0.72	$\sim 10^{-1}$	$2.04 \cdot 10^{19}$

C (diamant)	5.4	$\sim 10^{12}$	$0.57 \cdot 10^{-20}$
-------------	-----	----------------	-----------------------

Données : Conduction électriques dans les solides, Tech. Ingé, Olivier Bourgeois & al.

Constats :

- on remarque que le nombre de porteur de charge est bien plus faible pour les isolants que pour les semi-conducteurs à cause du gap d'énergie,
- le Ge et Si étant de la même famille, la valeur de résistivité s'explique assez bien par le nombre de porteur de charge (variation de 4 ordres de grandeurs),

Bilan : La limite entre isolant et semi-conducteurs est empirique et définie autour de l'eV. Physiquement, c'est le nombre de porteur de charge mobile qui constitue une réelle différence entre un isolant et un semi-conducteurs.

TRANSITION : Les comportements « naturels » des éléments chimiques peuvent être classifiés selon 3 catégories : métaux, isolants, semi-conducteurs. Les chimistes cherchent à manipuler ces matériaux afin d'en contrôler le nombre de porteur de charge. Une façon d'y parvenir est le dopage.

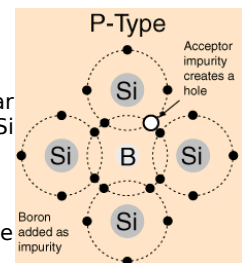
III/ Un objectif du chimiste : contrôler la conduction

1. Dopage : un contrôle fin de la concentration en porteur de charge

Le dopage consiste en l'ajout d'impureté présentant un excès ou un déficit d'électron par rapport à l'élément majoritaire. On parle de semi-conducteurs III-V par comparaison au Si (IV).

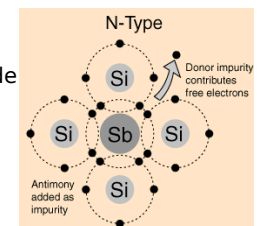
• **Dopage P (III)**

Ajout d'un déficit d'électron en mettant un élément ayant un électron de valence de moins que le silicium (élément de la IIIe famille).



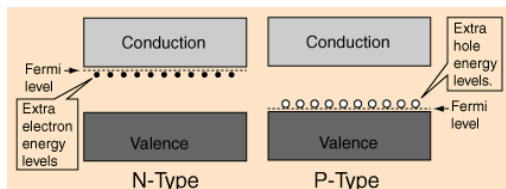
• **Dopage N (V)**

Ajout d'un excès d'électron en mettant un élément ayant un électron de valence de plus que le silicium (élément de la Ve famille).



voir aussi : Physique, Hecht.

Conséquences sur les bandes d'énergie :



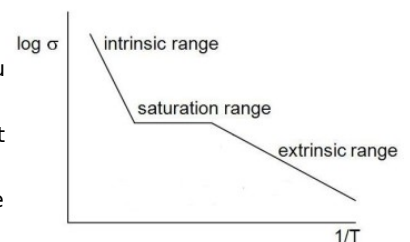
[tiré de hyper-phys]

[tiré de hyper-phys]

Le niveau de Fermi est placé entre le dernier niveau occupé et le premier niveau vide, ce qui change son emplacement sur le diagramme d'énergie des semi-conducteurs dopés.

Explication des régimes de conductivité avec le dopage N :

- régime extrinsèque : les niveaux dopés servent de réservoir à électrons au niveau de conduction,
- régime de saturation : tous les électrons des niveaux dopés sont activés et ceux de la bande de conduction ne peuvent pas,
- régime intrinsèque : les électrons de la bande de valence peuvent être promus dans la bande de conduction.

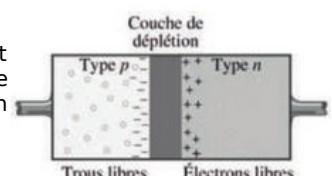


2. Le dopage dans l'élaboration de matériaux électroniques : la jonction p-n

On peut facilement expliquer la polarisation d'une diode par une simple analyse de la répartition des porteurs de charge dans la jonction p-n.

Répartition des porteurs de charge dans une jonction p-n à l'équilibre [tiré du PC/PC*, Ribeyre].

Après mise en série d'un semi-conducteur n avec un semi-conducteur p, on a établi un équilibre autour de la zone de déplétion d'un excès de charge négatif, du côté p, et d'un excès de charge positif, du côté n (équilibration des potentiels chimiques). Il y a localement un condensateur, où le champ électrique est orienté de n vers p.



1. **Zone normale** : Si on connecte un générateur et qu'on applique un potentiel de p vers n, autour de 60 mV de différence de potentiel, on **établit un champ électrique externe suffisant pour compenser celui dans la jonction**.

Le courant peut alors passer.

2. **Zone Inverse** : Un champ externe orienté dans le même sens que le champ interne à la jonction. On a alors un courant nul sauf si on applique des tensions grandes (60 V) pour augmenter la couche de déplétion.

Réf : PC/PC* de Ribeyre ; Physique, Hecht.

Conclusion

Faire un schéma-bilan des situations physiques (conducteurs/semi-conducteurs/isolants) + ODG des énergies de gap + ODG des résistivités.

Ouverture sur d'autres applications possibles : Panneaux solaires.

Remarques sur des points spécifiques de la leçon :

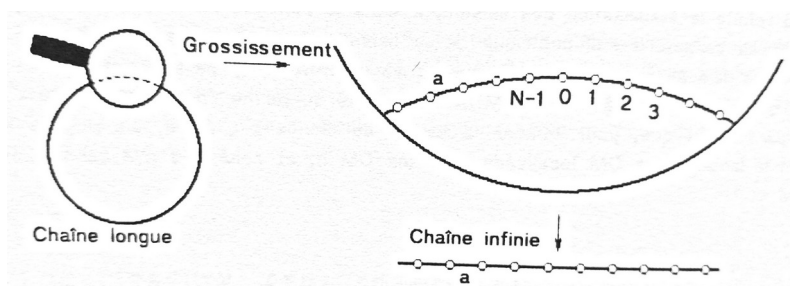
Les commentaires ci-dessous sont en lien avec la leçon ou liés aux questions/discussions réalisées avec les étudiants pendant la séance de question. Hors contexte, ils n'ont aucun sens :) !

• Énergie de Fermi vs niveau de Fermi :

Cette question est récurrente. La seule différence entre les deux est que le niveau de Fermi correspond au dernier niveau à 0 K tandis que l'énergie de Fermi serait le dernier niveau occupé à une température non nulle.

Un lien simple peut être établie dans le cas où kT est grand devant la différence d'énergie. Il s'agit du développement limité de Sommerfeld dont le premier terme est quadratique avec la température

• Conditions aux limites périodiques - théorème de Born-Von Karmen



Modélisation d'une chaîne infinie [tiré de liaison chimique et spectroscopie – Martial Chabanel & Pascal Gressier.]

Le traitement de la périodicité d'un cristal est une question mathématiquement complexe. La répétition périodique des atomes du réseau impose qu'un électron ait autant de probabilité de présence en un point x qu'en un point $x + a$, c'est-à-dire :

$$|\psi(x)|^2 = |\psi(x + a)|^2 \quad (*)$$

où ψ est la fonction d'onde électronique et a la périodicité du cristal.

Afin de prendre en compte le caractère infini de la chaîne pour la modélisation, on choisit que la chaîne soit modélisée par un cercle de rayon infini, où localement, les atomes du réseau sont alignés linéairement. Le caractère cyclique permet d'ajouter une condition supplémentaire à la précédente, si on translate la fonction d'onde N fois de a , alors on doit retomber sur le point de départ :

$$\psi(x + Na) = \psi(x)$$

Or la condition (*) peut s'écrire aussi :

$$\psi(x + Na) = C^N \psi(x)$$

avec $|C|^2 = 1$

On en déduit que :

$$\forall k, C^N = 1 = e^{j2\pi k} \implies C = e^{\frac{j2\pi k}{N}}$$

donc :

$$\psi(x + a) = e^{\frac{j2\pi k}{N}} \psi(x)$$

Félicitation, vous avez compris le **théorème le plus important** de la chimie du solide : le **théorème de Bloch** par le biais d'un simple dessin d'un système périodique et d'un cercle.

Quelle est la limite de cette modélisation ? Elle ne marche que si le rapport volume sur surface est grand, c'est-à-dire que la majorité des atomes constituant le cristal ne sont pas aux extrémités, c'est-à-dire que les effets de bords sont négligeables.

- **Les modèles type électron libre**

Une trame générale des grandes idées sur des modèles un peu plus physique où je vous illustre simplement les grandes idées pour que ça soit au propre dans votre esprit.

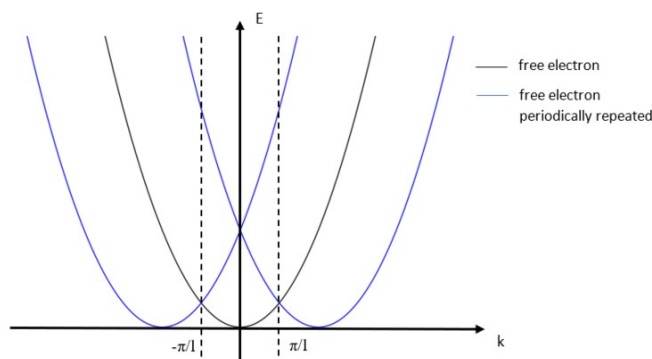
Je rappelle les notions suivantes. La PZB [Première Zone de Brillouin] est la région dans un cristal 1D comprise entre $k = -\pi/a$ et $k = \pi/a$. Cet intervalle est suffisant pour décrire l'intégralité des bandes, il contient toute l'information physique [attention, la PZB est quelque chose de très important, c'est l'équivalent de la maille dans l'espace direct. Il y a un réel sens physique derrière et on peut comprendre la conduction en l'utilisant par exemple].

Electron libre : le modèle de l'électron libre est basé le modèle de la particule dans une boîte. Il combine trois ingrédients que sont :

- un électron décrit par une **onde plane** harmonique, d'énergie cinétique

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$$

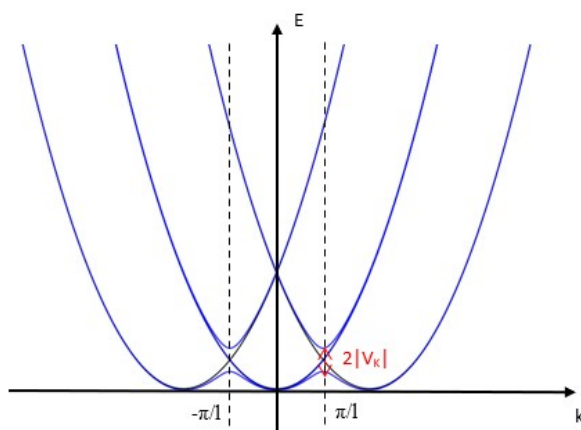
- un système périodique qui a pour conséquence de discrétiser les niveaux d'énergies attendus. Ceci a pour conséquence que la parabole d'énergie se répète tous les $2\pi/a$ dans l'espace des k .



Représentation de trois paraboles
[réalisé par les L3 de l'ENS
Chimie]

Il n'y a pas de discontinuité des états d'énergie dans la PZB. Ceci se traduit par une bande d'énergie continue dans une représentation en bande.

Electron quasi-libre : il s'agit d'ajouter l'**effet du réseau**, comme une petite perturbation à l'énergie cinétique de l'électron. Pour des raisons de périodicité, le réseau impacte au premier ordre uniquement les frontières de la PZB.



Représentation de trois paraboles avec la levée de dégénérescence au bords. Le terme V_k correspond au couplage des ondes planes associées aux électrons.

[réalisé par les L3 de l'ENS Chimie]

Physiquement, on peut relativiser facilement ce comportement. Le réseau a pour effet de **superposer les états quantiques voisins dans l'espace des k deux à deux**. Par exemple, en regardant la superposition des courbes d'une onde plane de vecteur d'onde k (celle du milieu) et d'une autre venant de $k - 2\pi/a$ (celle de droite), soit

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &\sim e^{ikx} \\ \psi_2(x) &\sim e^{j(k - \frac{2\pi}{a})x}\end{aligned}$$

Or les ondes planes ne peuvent se mélanger que si leur énergies cinétiques sont relativement proches, ce qui implique que :

$$k^2 = \left(k - \frac{2\pi}{a}\right)^2$$

ce qui se traduit par :

$$\frac{4\pi}{a} \left(\frac{\pi}{a} - k\right) = 0 \implies k = \frac{\pi}{a}$$

Ceci correspond à la limite des **PZB**, que l'on appelle les **plans de Bragg**. On peut alors représenter le diagramme de bande avec les gaps.

Par rapport aux approches tight-binding, la construction des bandes ne dépend pas d'orbitales, lesquelles sont spécifiques à la nature des éléments chimiques, mais seulement d'un gaz d'électron. Ces modèles décrivent relativement bien **les métaux alcalins** et certains autres éléments comme **l'aluminium ou certains métaux nobles (Pt, Cu, ...)**. Ils permettent d'appréhender certains comportements relativement uniforme et universel de ces éléments chimiques :

- conductivité électrique,
- conductivité thermique via la loi de Wiedemann et Franz,
- la magnétorésistance et l'effet Hall.

Mais la force n'est pas dans la prédiction mais dans le sens physique, le langage et le vocabulaire qu'ils apportent aux solides métalliques et leur fonctionnement.

Bibliographie :

• Contextualisation

Activité documentaire : bandes d'énergie, Tout-en-un, Fosset : Excellente contextualisation et mise en perspective avec l'expérience ;

Approche documentaire : conduction électrique, Chp. 11, Tout-en-un, Chimie PC/PC, DeBoeck, Ribeyre* : Pareil que pour le Fosset ;

<https://toutestquantique.fr/metaux/>, *Métaux et Isolants* : Différence Quantique, vidéo réalisé par Julien Bobroff, un maître dans la vulgarisation de la physique quantique ;

<https://www.cea.fr/multimedia/Pages/animations/energies/panneaux-solaires.aspx> : représentation iconographique pouvant servir de base à une ouverture sur les jonctions p-n ;

<https://www.societechimiquedefrance.fr/LEDs.html?lang=fr> : page dédiée aux LEDs ;

<http://www.mineralinfo.fr/ecomine/silicium-element-chimique-tres-abondant-affinage-strategique> : de nombreuses figures sur les enjeux autour du silicium, de sa production et son exploitation [données tirées du BRGM] ;

Physique, Eugene Hecht, Chp. 23 : Courant alternatif & électronique : quelques représentations simples de principe d'une diode et de son utilité.

• Données

<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/solcon.html> : Tables de données expérimentales : niveau de Fermi, conductivité, énergie de gap des semi-conducteurs, extrêmement utile en physico-chimie des solides.

Conducteurs métalliques - Présentation générale, Jean-Charles Delomel : Pour avoir des ordres de grandeurs de conductivité thermique dans quelques métaux communs à température ambiante ;

Structure électronique des solides : métaux et oxydes, Chp. 4, Marucco : Quelques discussions concrètes sur la conductivité d'isolants et conducteurs. Le chapitre a le mérite de découper la discussion en fonction de la position dans le tableau périodique.

Bottin-Mallet : Largement utilisé par l'agrégatif, celui-ci présente de nombreux cas d'école.

- **Modèles**

Conduction électrique dans les solides - Introduction et théories élémentaires, Olivier Bourgeois : Excellent résumé des théories élémentaires sur la conduction électrique (modèle de Drude, Lorenz et Sommerfeld) ;

Solid State Physics, 2nd Edition, J.S. Blakemore : Livre de physique du solide mettant l'accent sur les concepts plutôt que sur le développement mathématique. Peut-être utilisé par les chimistes pour se faire une idée précise du transport d'électron et de ses niveaux de description ;

Structure électronique des solides - généralités, Chp. 3, Marucco : Sépare une approche *tight-binding* construite sur la théorie des OM (semi-conducteurs, ioniques) d'une approche basée sur l'électron libre (métaux) ;

Liaison dans les solides et propriétés électroniques, Chp. 4, Smart & Moore : Equivalent à la partie LCAO du Marucco au Chp. 3 ;

Interactions électrons-réseau, Chp. 5, Cours de Boilot : Approche *tight-binding*/LCAO/Hückel avec quelques discussions intéressantes sur les spectres d'énergie obtenus en fonction des orbitales atomiques considérées ainsi que quelques spectres expérimentaux (absorbance et conductivité à la Fig. 9) ;

Liaison chimique et spectroscopie, Chabanel et Gressier, Ellipses : Plus calculatoire, le Chp. VI permet un traitement Hückel des chaînes 1D.

Le solide cristallin, R. Collongues : un des meilleurs livres à la fois court et très explicite sur la théorie des bandes !