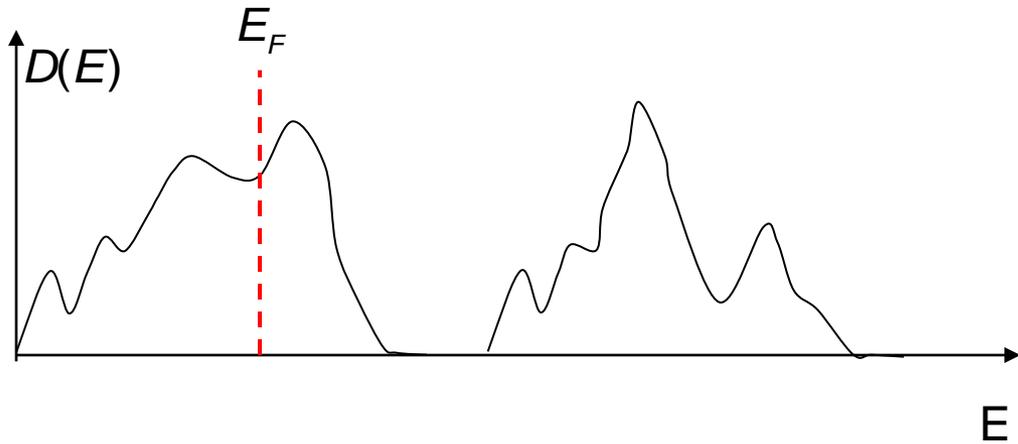


3) Les électrons dans le solide

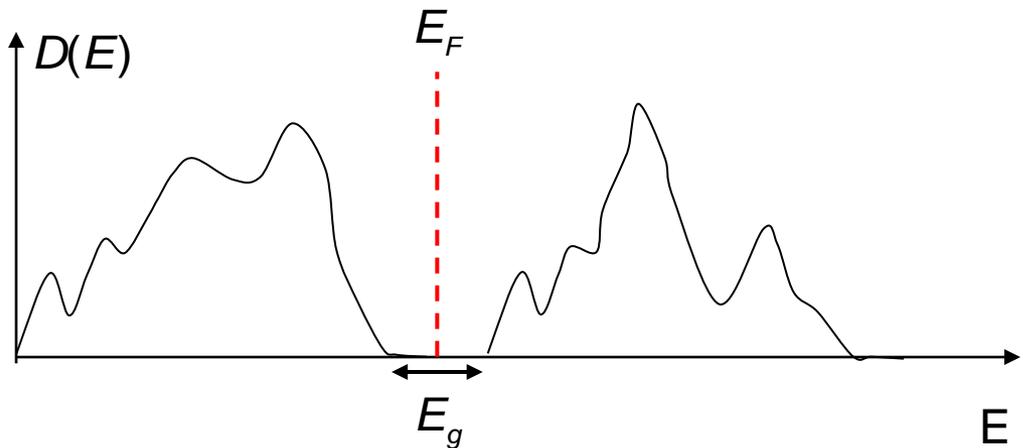
3.7 Comprendre les structures de bandes

3.7.1 Métaux isolants semi-conducteurs

Métal



Isolant



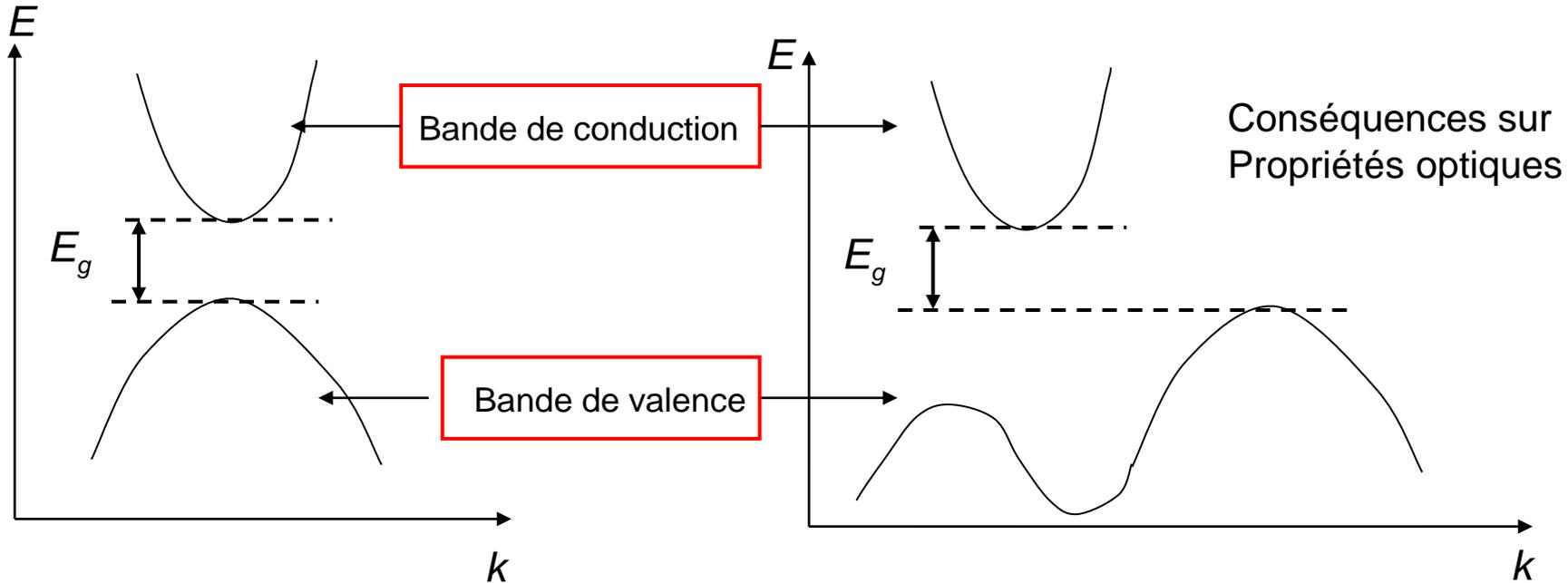
$E_g > 3\text{eV}$ Isolant

$E_g \leq 2\text{eV}$ Semi-conducteur

3) Les électrons dans le solide

Gap direct

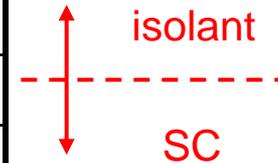
Gap indirect



Fraction d'électrons thermiquement excités

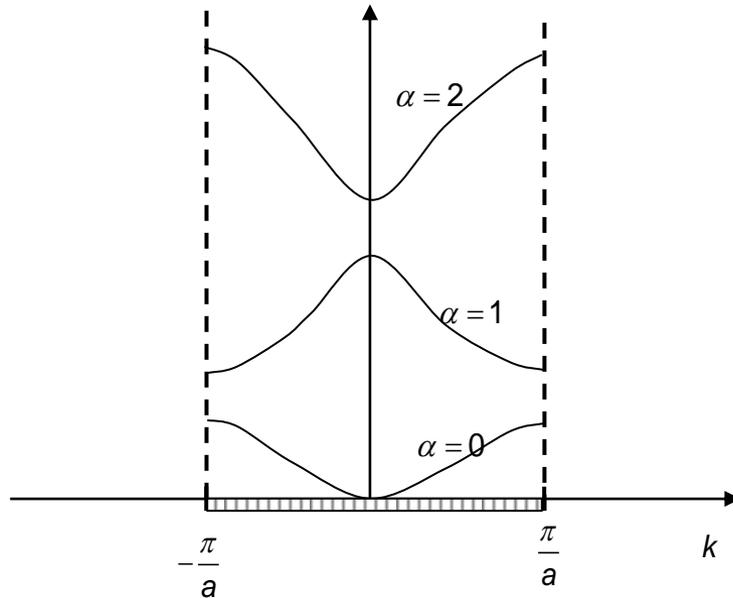
$$n(T) \sim e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$$

E_g	$n(T=300K)$	type
4eV	10^{-35}	isolant
2eV	10^{-17}	limite
0.25eV	10^{-2}	SC



3) Les électrons dans le solide

Compter les états possibles



N états énergétiques par branche correspondant à N mailles

2 électrons (spins $\uparrow\downarrow$) par états



$2N$ états par branche

1 atome/maille avec 1 électron par atome \equiv bande à moitié remplie donc métal

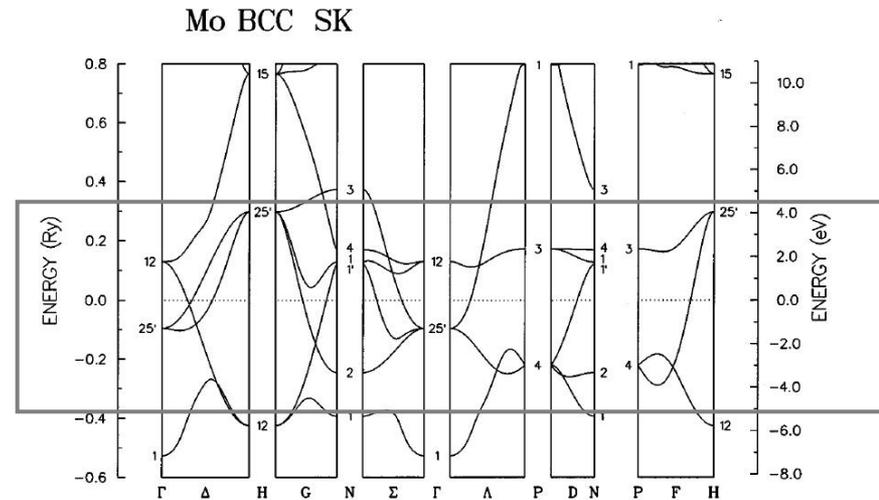
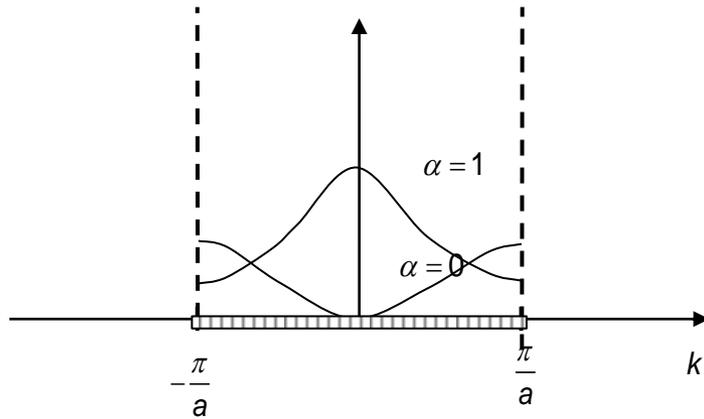
$\left. \begin{array}{l} \text{Cu } 4s^1 \\ \text{Ag } 5s^1 \\ \text{Au } 6s^1 \end{array} \right\} \text{ Métaux nobles}$

3) Les électrons dans le solide

- Nombre pair d'électrons = isolant????

Pas si simple car les bandes peuvent se recouvrir

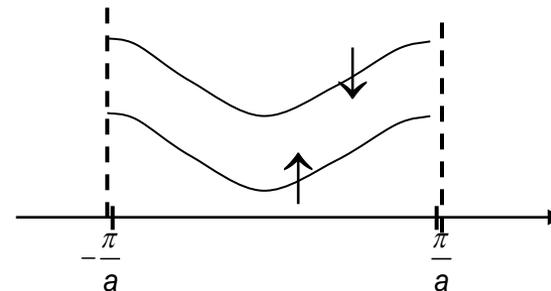
- Les bandes issues d'une même orbitale se « mélangent » toujours
- Les bandes d des métaux de transition forment un plat de spaghetti!!!
- Les bandes issues d'orbitales différentes peuvent aussi se mélanger!



- Et les matériaux magnétiques:

branche \downarrow et branche \uparrow distinctes

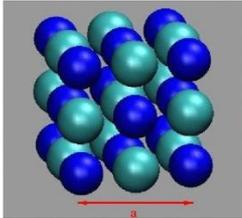
Un spin par branche



3) Les électrons dans le solide

3.7.2 Quelques exemples significatifs

Cristaux ioniques

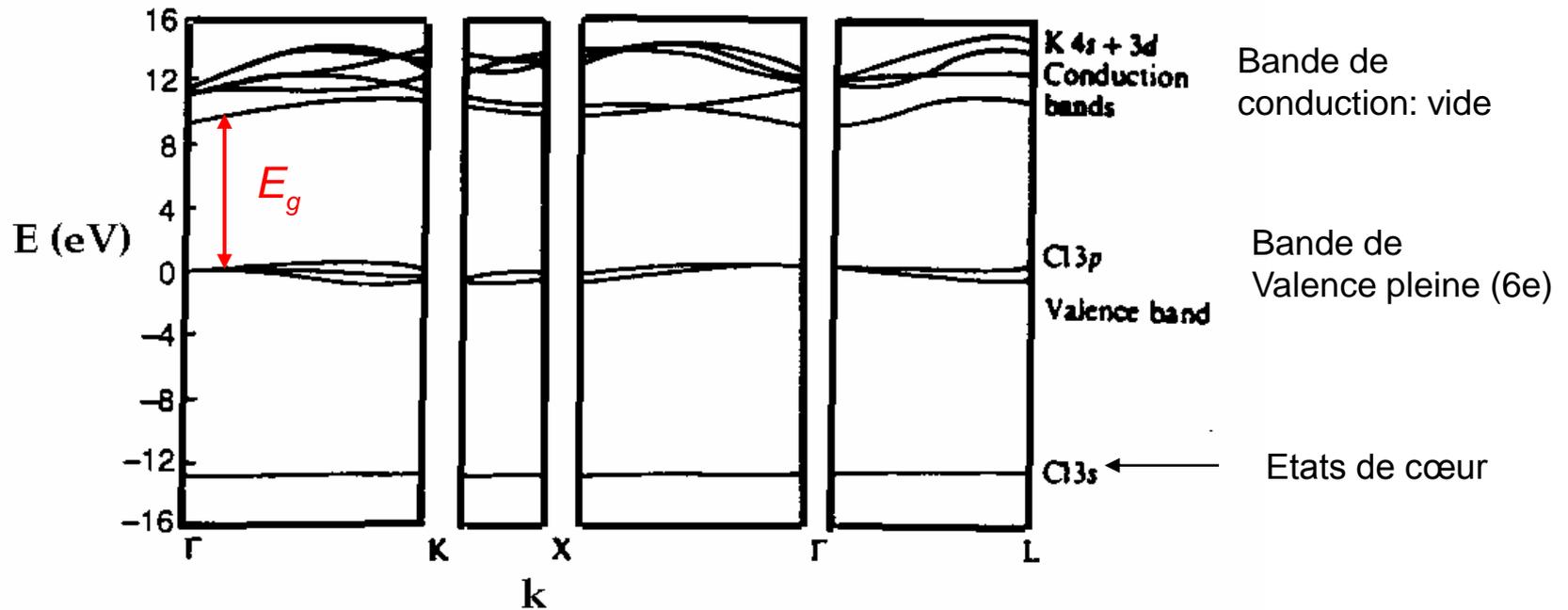


$\text{KCl} = \text{K}^+ \text{Cl}^-$
Structure Zinc Blende

Configuration atomique

$\text{K } 4s^1$ $\text{Cl } 3s^2 3p^5$

Energy bands of KCl



3) Les électrons dans le solide

Un exemple « amusant »: NaCl

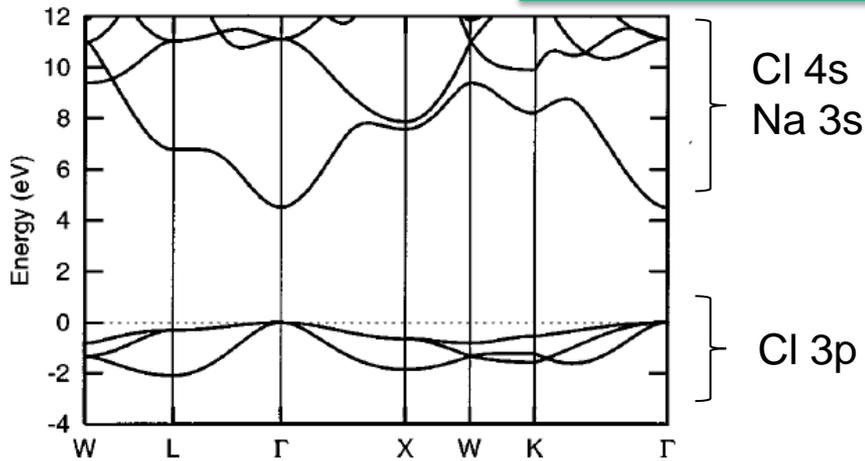


Fig. 1. The band structure of NaCl.

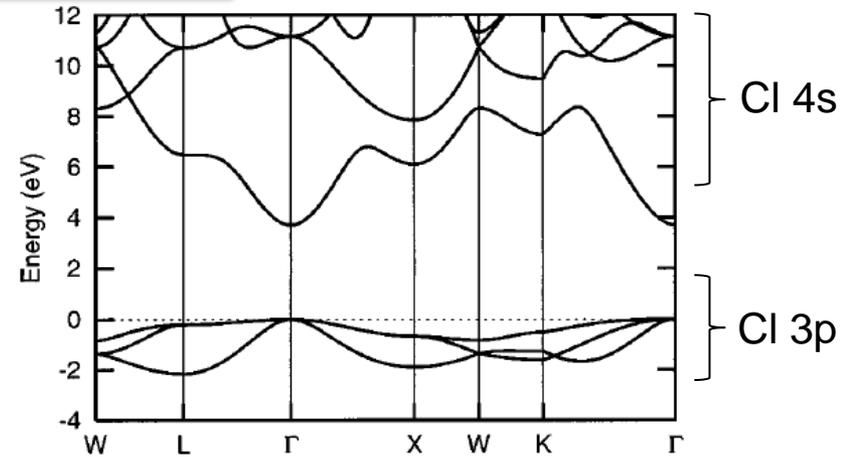


Fig. 3. The band structure of a fcc lattice of Cl^- ions.

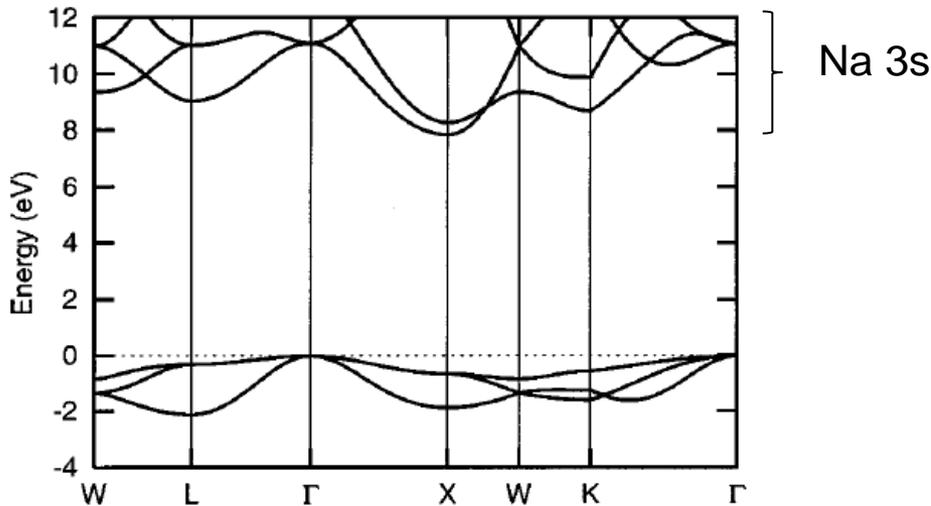


Fig. 2. The band structure of NaCl, without Cl 4s states.

Configuration atomique

Na $3s^1$ Cl $3s^2 3p^5$

The origin of the conduction band in table salt

P. K. de Boer and R. A. de Groot

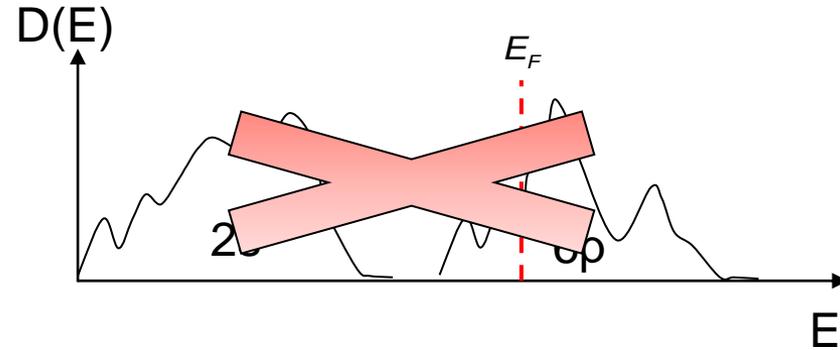
American Journal of Physics

Volume 67, Issue 5, pp. 443 (1999)

3) Les électrons dans le solide

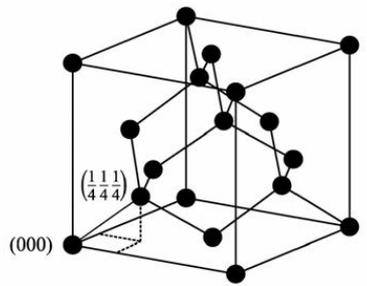
Cristaux covalents

C,Si,Ge: configuration atomique ns^2np^2

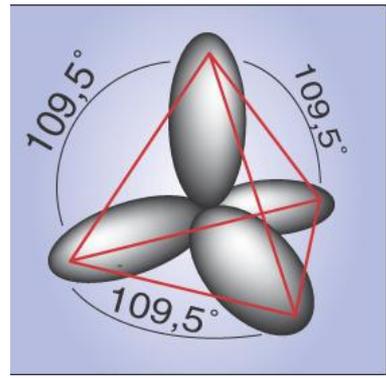
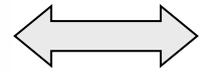


METAL?
NON

Hybridation sp^3



Structure diamant
2 atomes/maille



$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_1 = \frac{1}{2}(s + p_x + p_y + p_z) \\ \Psi_2 = \frac{1}{2}(s + p_x - p_y - p_z) \\ \Psi_3 = \frac{1}{2}(s - p_x + p_y - p_z) \\ \Psi_4 = \frac{1}{2}(s - p_x - p_y + p_z) \end{array} \right.$$

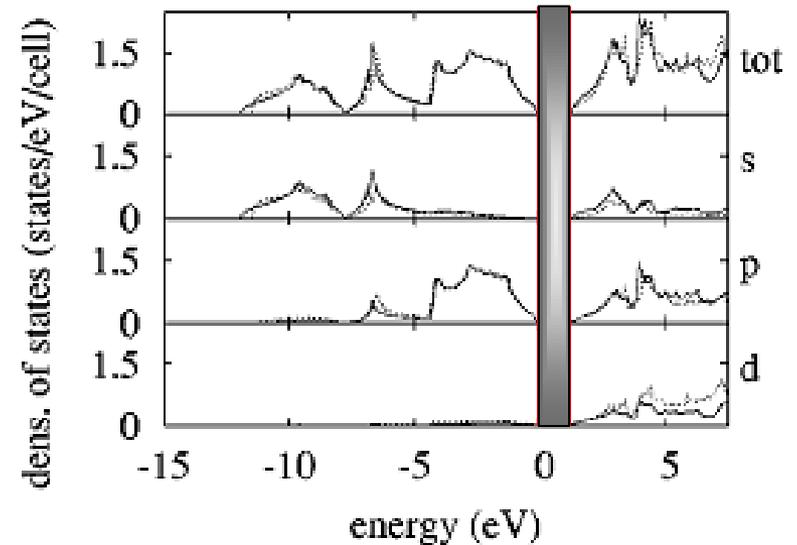
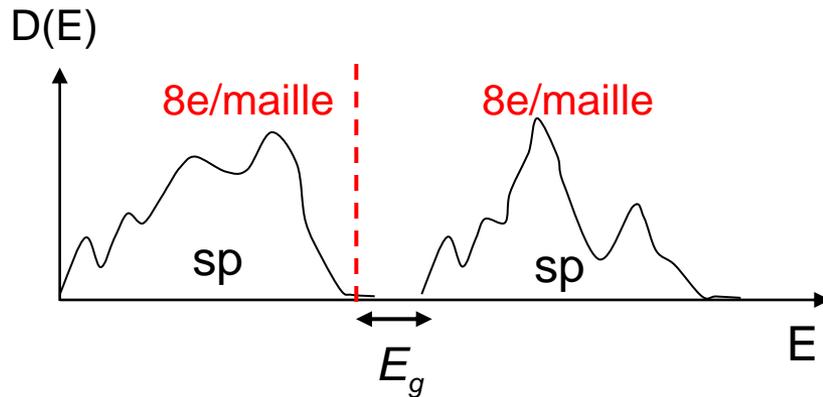
Couplage structure électronique/Structure atomique

3) Les électrons dans le solide

Recompter les états possibles

8 états électroniques par atome (en comptant le spin) → 16 états par maille

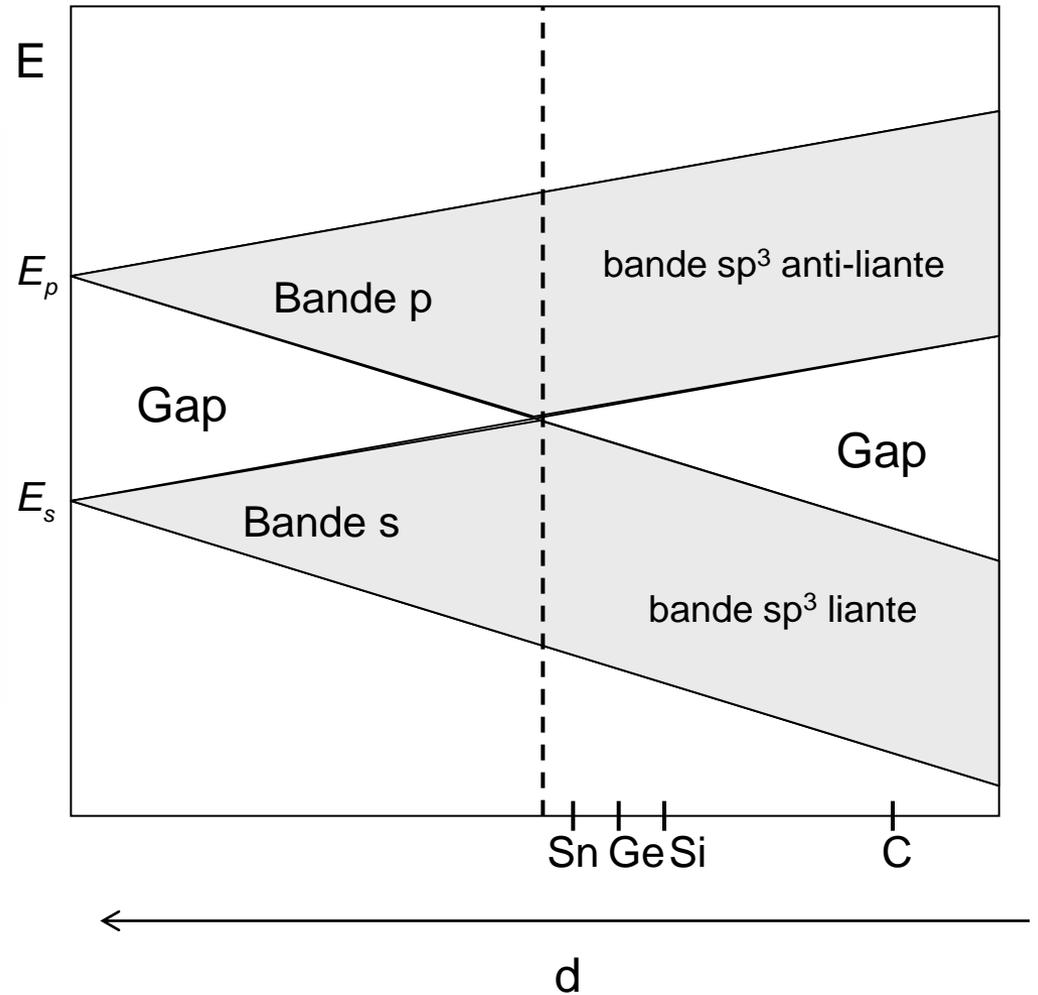
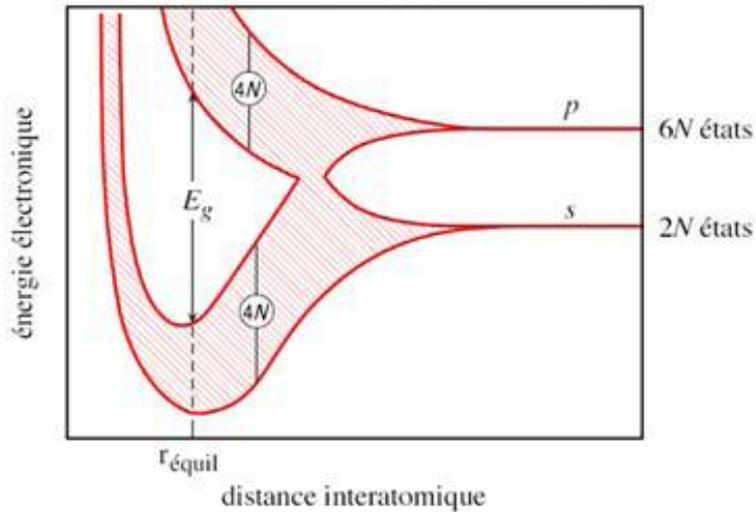
4 électrons par atome → 8 électrons par maille



Semi-conducteurs

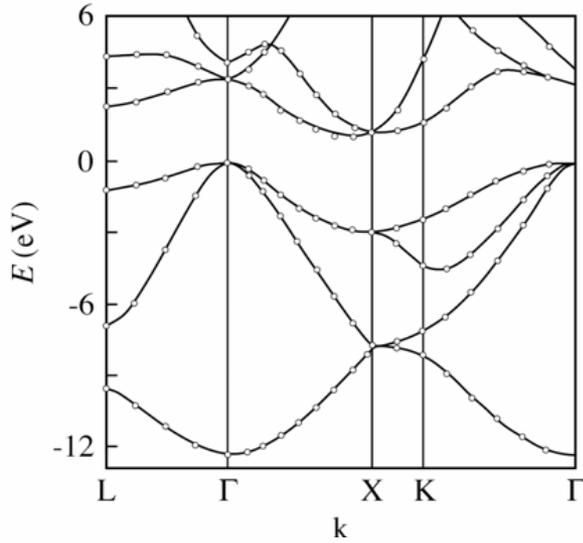
3) Les électrons dans le solide

Comment les bandes se forment (et se déforment)?



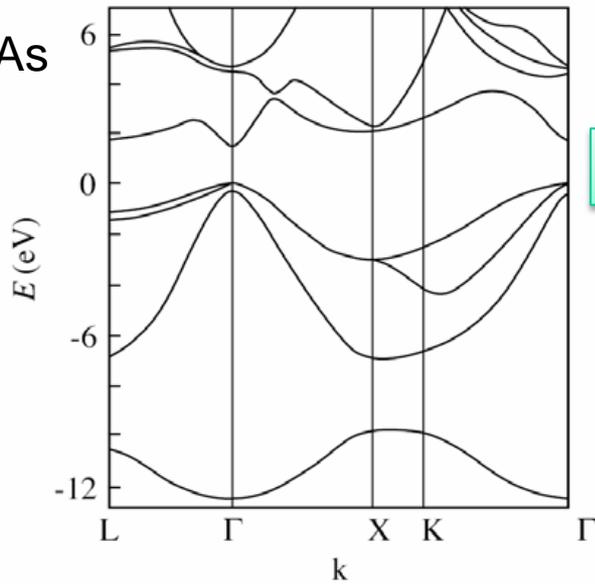
3) Les électrons dans le solide

Si



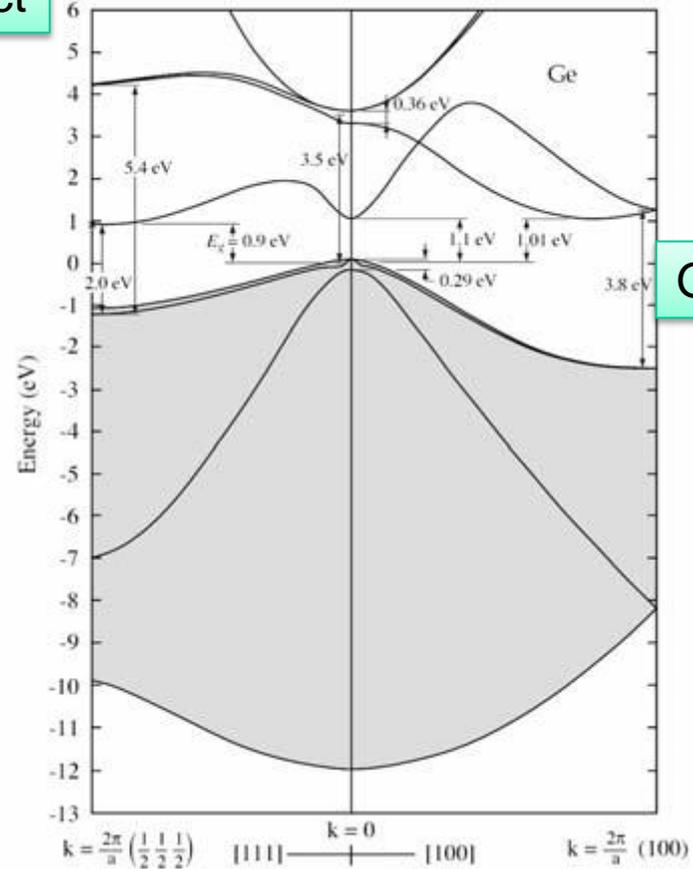
Gap indirect

GaAs



Gap direct

Ge

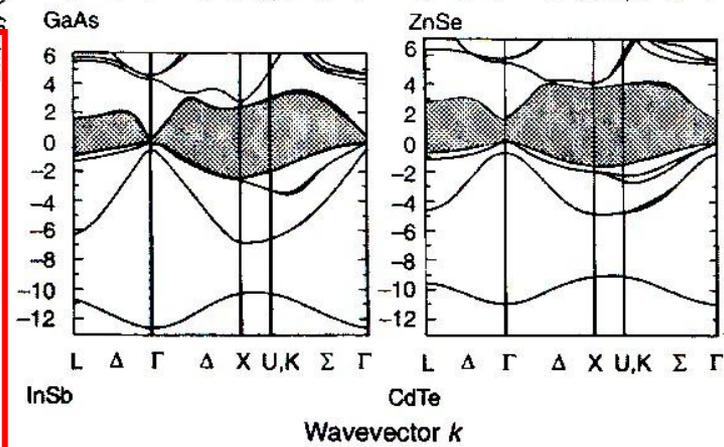
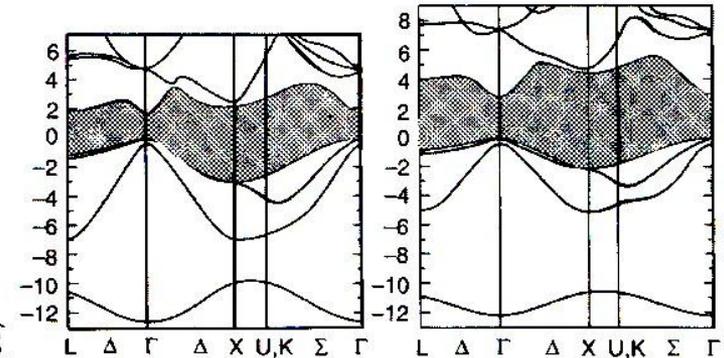
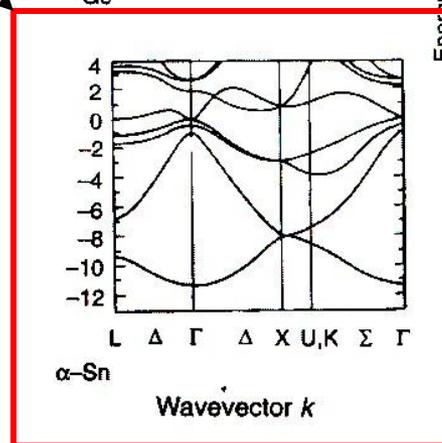
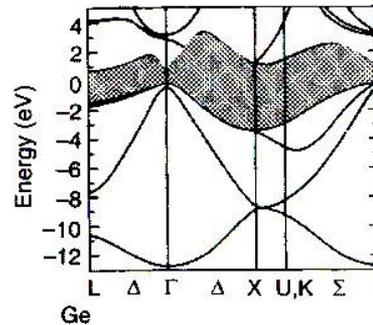
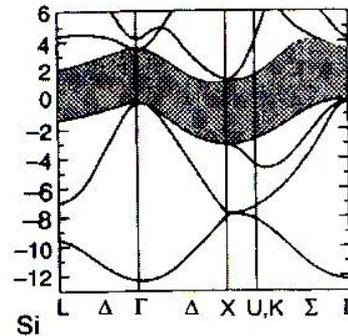


Gap direct

3) Les électrons dans le solide

cristal	type	Gap (eV)
C	indirect	5.4
Si	indirect	1.17
Ge	indirect	0.74
α -Sn	direct	0.00
GaP	indirect	2.32
GaAs	direct	1.52
GaSb	direct	0.81

Semi-conducteur à gap nul!
= Semi-métal

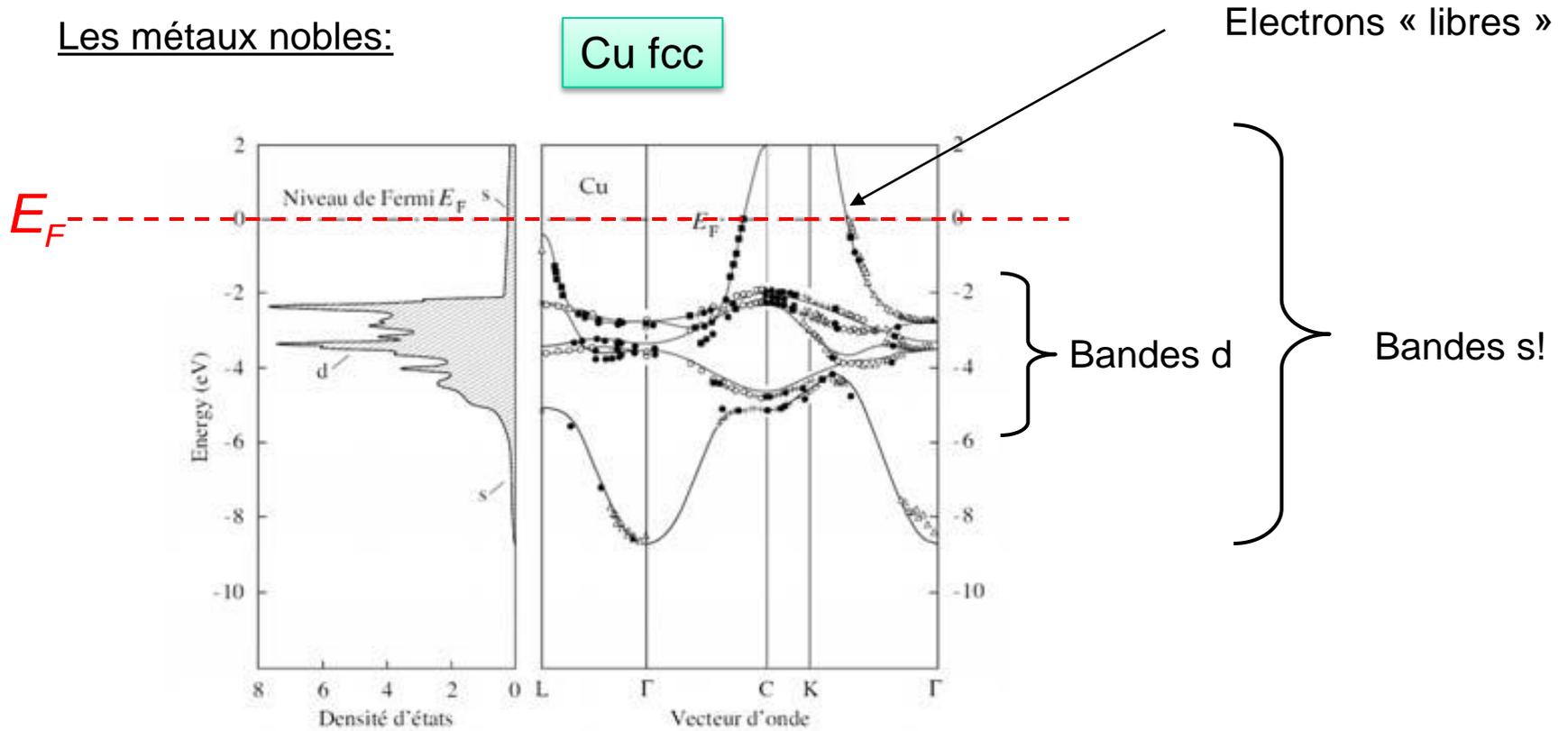


3) Les électrons dans le solide

Les Métaux

Les métaux nobles:

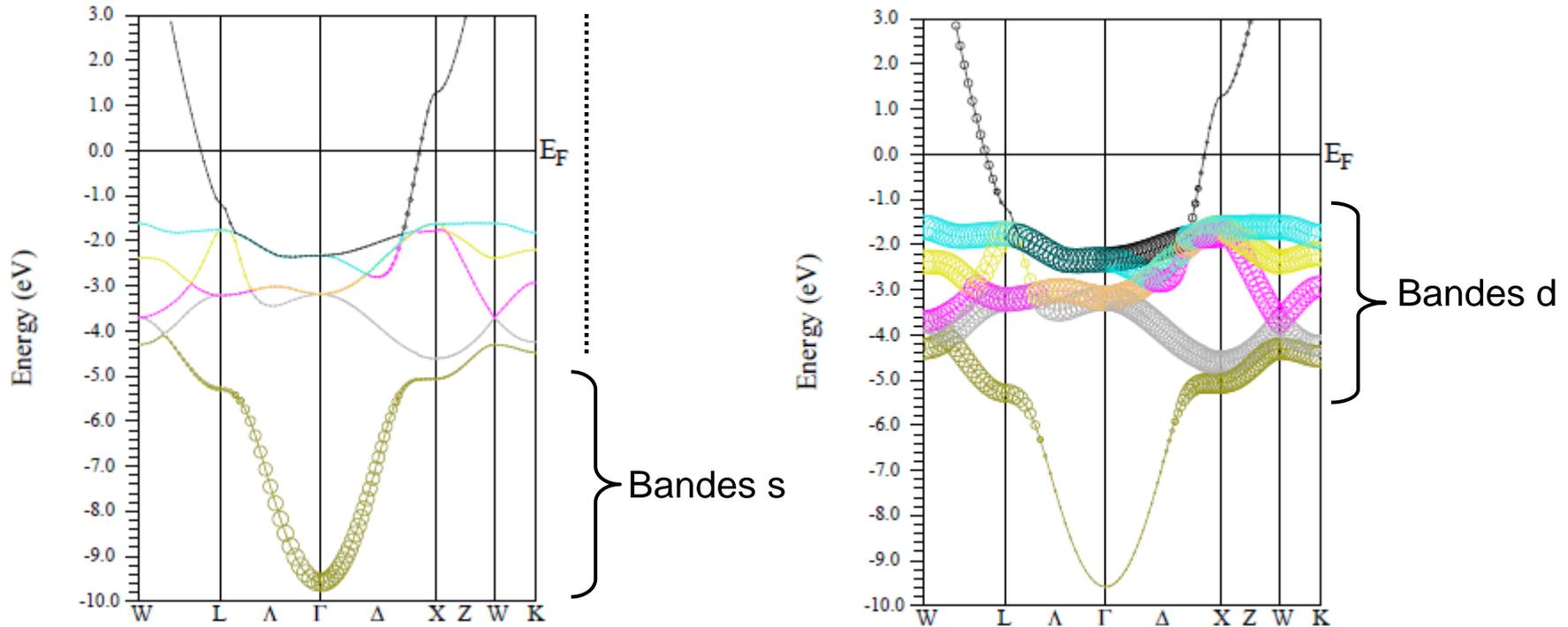
Cu fcc



3) Les électrons dans le solide

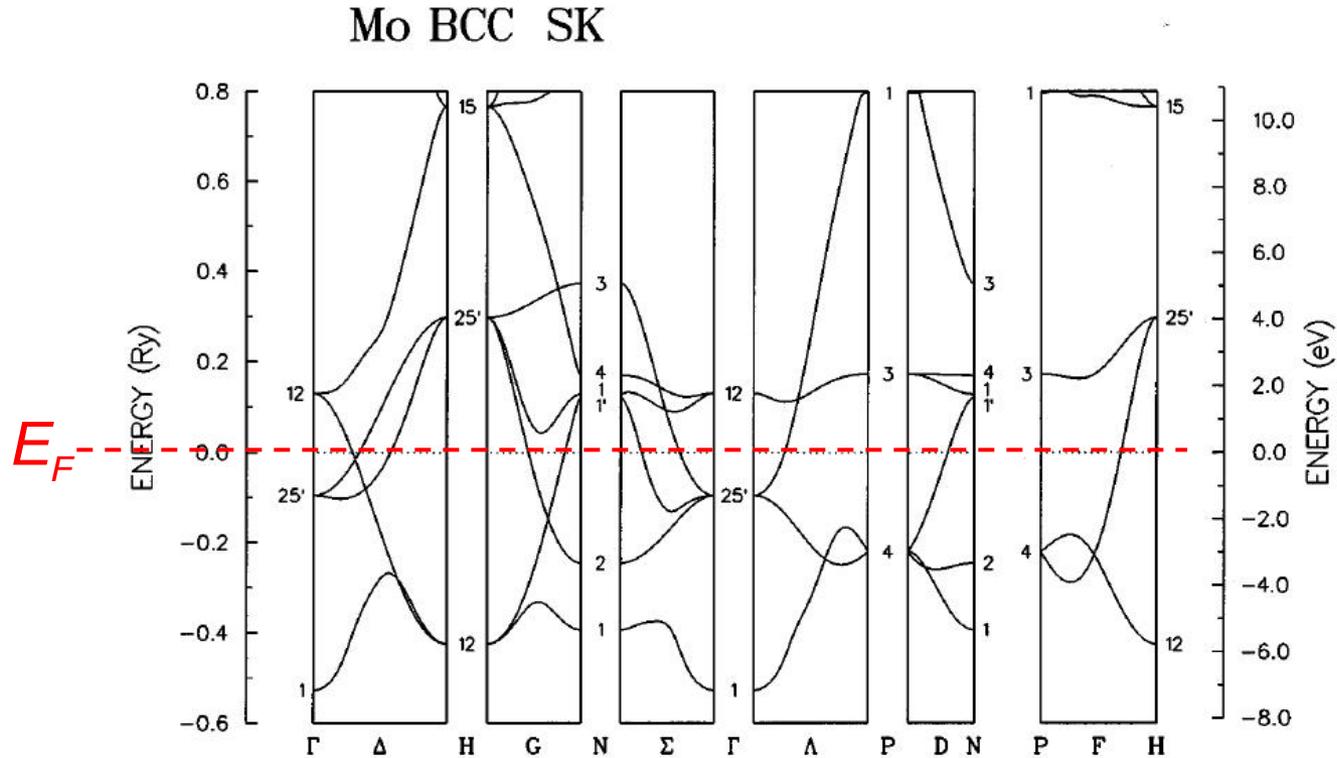
Cu fcc

Contribution des différentes orbitales: spd



3) Les électrons dans le solide

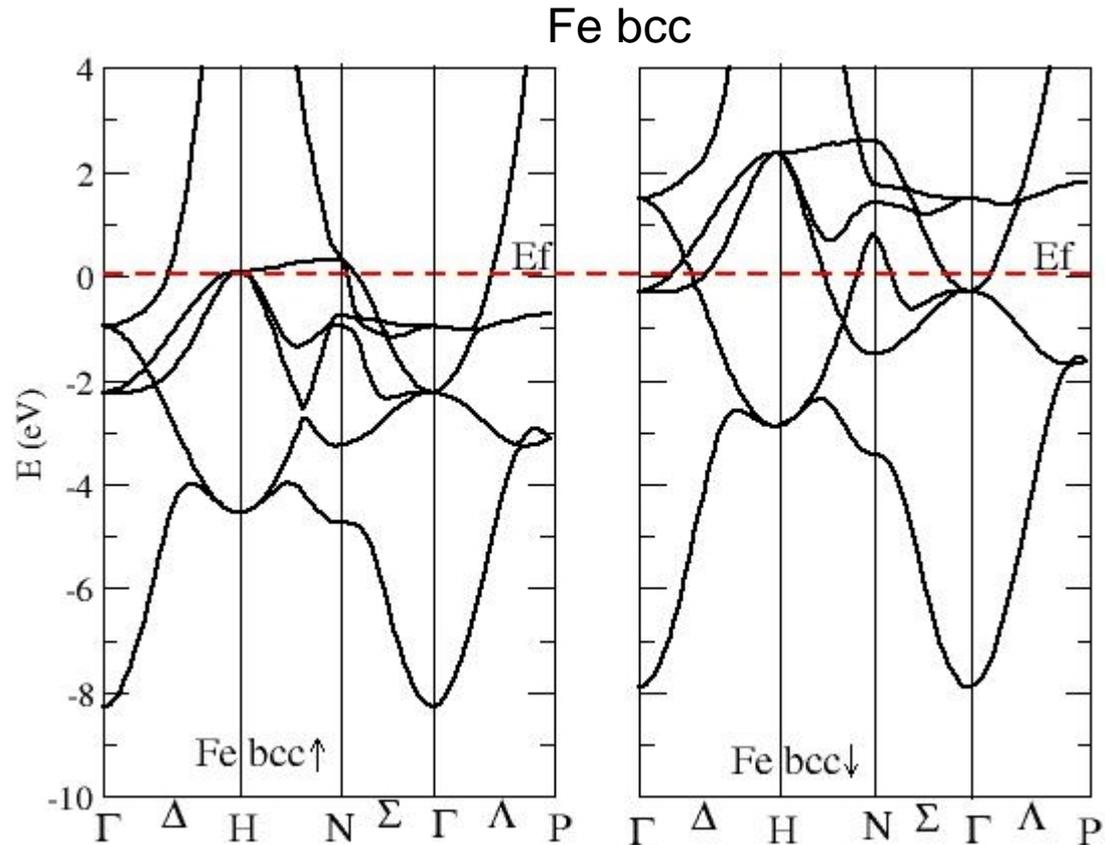
Les métaux de transition: le plat de spaghetti



3) Les électrons dans le solide

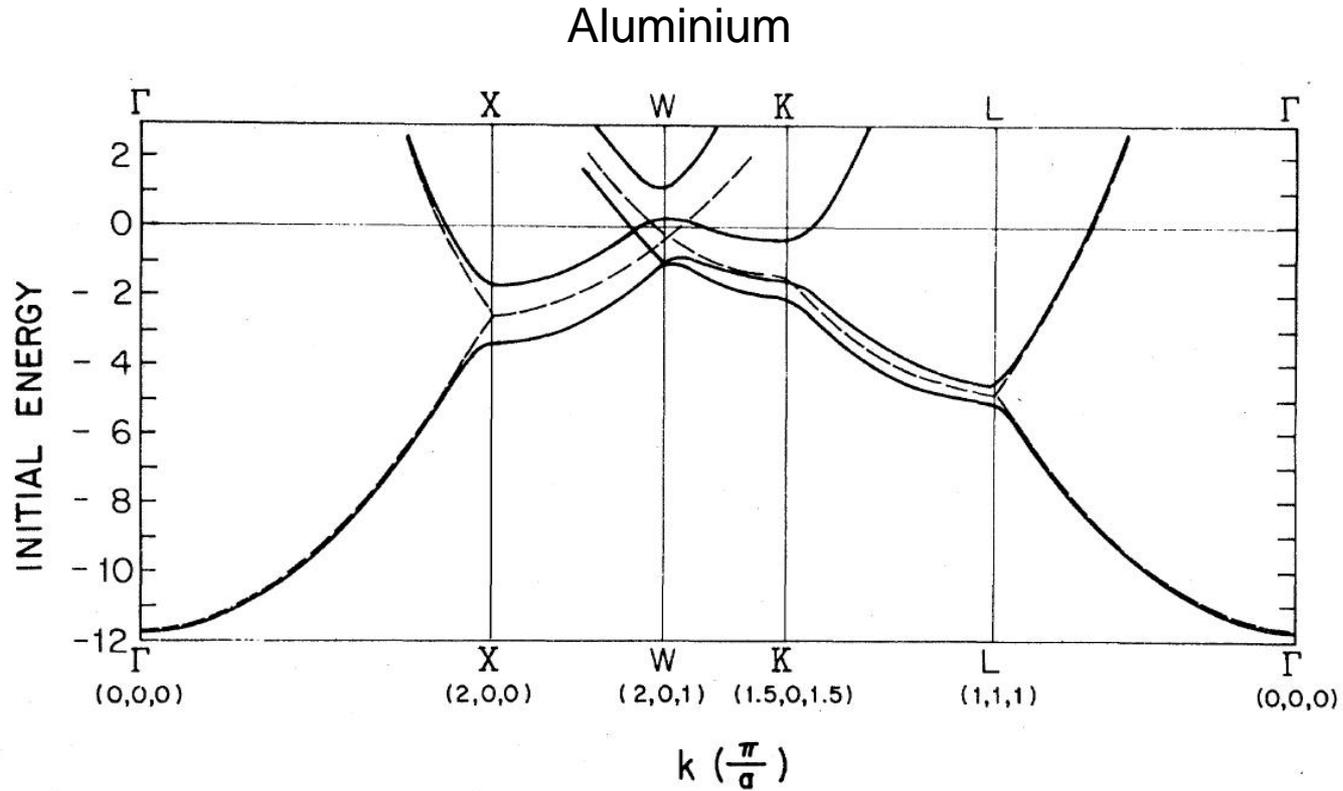
Les métaux de transition magnétiques

Fe bcc: magnétisme non saturé



3) Les électrons dans le solide

Les métaux trivalents

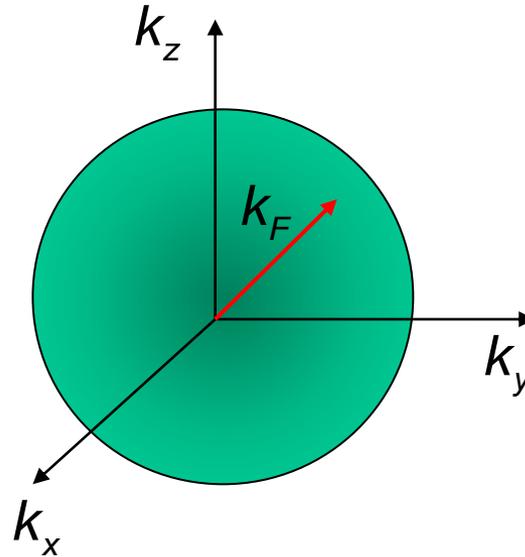


3) Les électrons dans le solide

3.7.3 La surface de Fermi

- Electrons libres: la sphère de Fermi

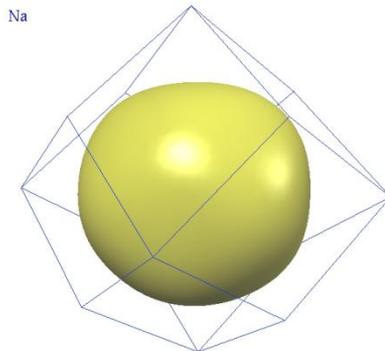
Surface telle que $E(\vec{k}) = E_F$



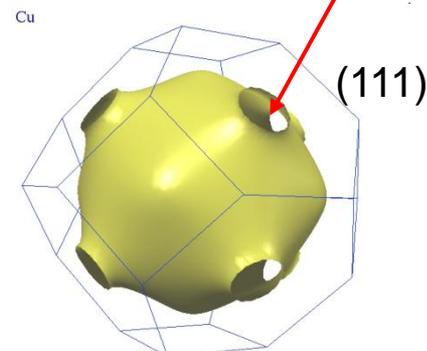
$$E(\vec{k}) = E(\|\vec{k}\|) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$E(\vec{k}) = E_F \Leftrightarrow \|\vec{k}\| = k_F$$

- Electrons presque libres: la sphère de Fermi déformée



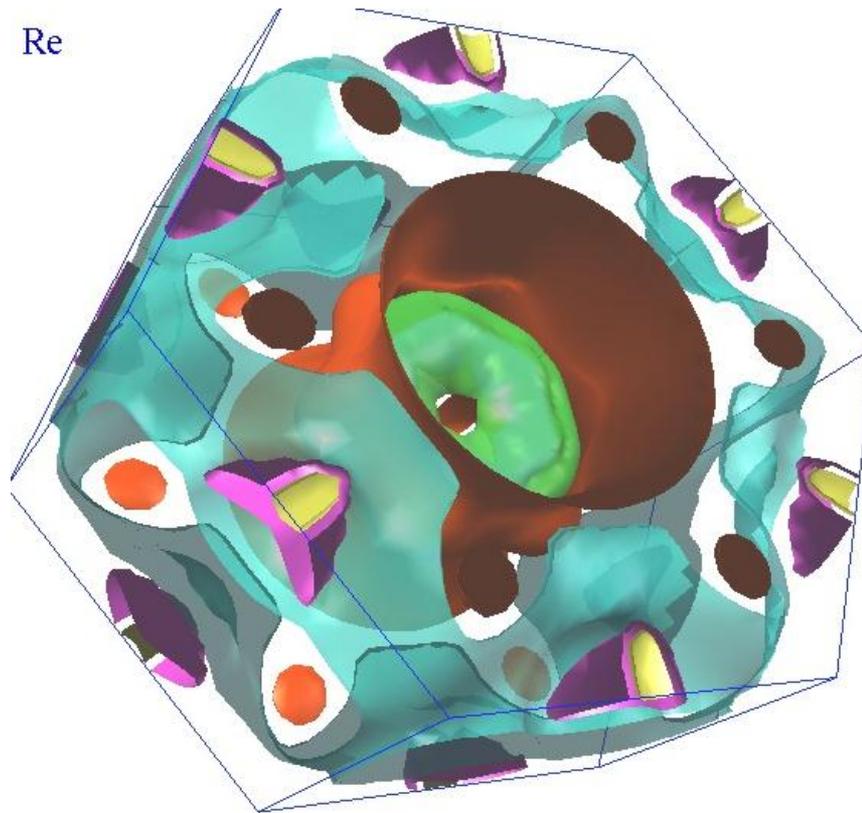
Na



Cu

3) Les électrons dans le solide

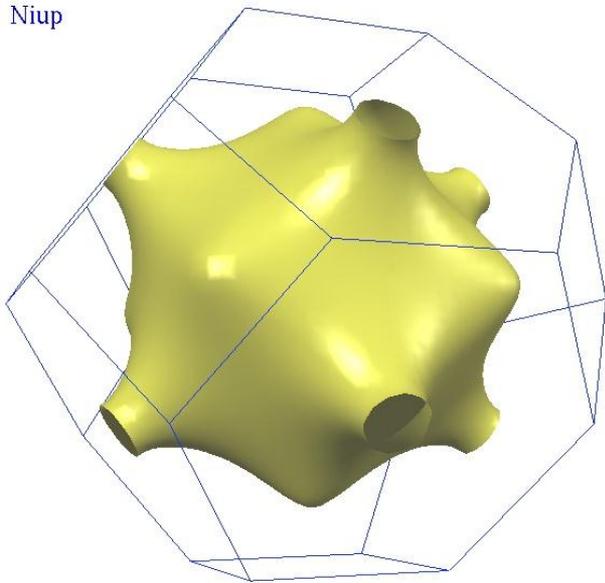
- Métaux de transition: l'horreur absolue!!!



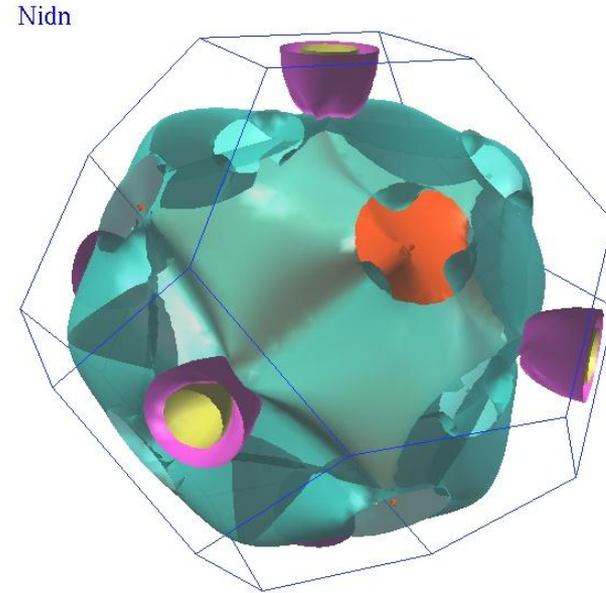
3) Les électrons dans le solide

- Métaux magnétiques: 2 surfaces de Fermi

Ni up



Ni down



Bande d pleine \rightarrow Ni up \approx Cu