

L3

Prérequis

~~OM~~ ~~AN~~
~~OM~~ ~~AN~~

Det séculaire

I7 Prop 'électroniques

a) Format^o des bandes.

2 modèles :
→ approx ^{électron} quasi libres
(e⁻ piégés ds une boîte de pot périodique)
niveau basse énergie → cations.
→ approx liaisons fortes.
(e⁻ de valence occupent des orb molé OM
délocalisées s/p/t le solide)

→ lim au dernier modèle.

1 seul dim alignem^t ∝ d'atome
1 orb s.

⇒ construire ^{orb} LCAO du solide en alignant N atomes les
un à la suite des autres en déduire structure électronique
puis remplissage

→ p 724 20.51 Atkins De Paula Chimie Physique 3^{ème} éd.

↳ 2 atomes ⇒ 1 liantes + 1 anti l
3 atomes ⇒ 1 " " " 1 nt.
4 atomes 2 li 2 anti

⇒ Pour N atomes N orb mol couvrant une bande d'énergie
de largeur finie α le det séculaire de Hückel

$$\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta & 0 & \dots & 0 \\ \beta & \alpha - E & & & \\ 0 & \beta & & & \\ \vdots & & & & \\ 0 & & & \beta & \alpha - E \end{vmatrix} = 0$$

(2)

$$\text{det sym (trigonal)} \Rightarrow E_k = \alpha + 2\beta \cos \frac{k\pi}{N+1} \quad k=1, 2, \dots, N$$

$$k=1 \Rightarrow E_1 = \alpha + 2\beta \cos \frac{\pi}{N+1}$$

$$N \rightarrow \infty \Rightarrow \cos 0 = 1$$

$$E_1 = \alpha + 2\beta$$

$$\text{Qd } k=N \quad E_N = \alpha + 2\beta \cos \frac{N\pi}{N+1}$$

Qd $N \rightarrow \infty$ on ne peut négliger ± 1 du dénominateur
 $\cos \pi = -1$

$$\Rightarrow E_N = \alpha - 2\beta$$

$$\text{donc } E_N - E_1 \rightarrow 4\beta$$

$k=1$: totalement liante

$k=N$: totalement antiliante

→ Figure 20.52 Atkins de Paula

bande formée par orb s = bande s
 bande formée par orb p = " p

bande interdite = domaine d'énergie auquel ne corresp aucune orbitale

bande s & p peuvent être contiguës & n° se recouvrent

→ A trouver

b) Occupat° orbital

$$T=0 \quad \frac{1}{2} N \text{ orbital occ (} \epsilon \oplus \text{ faible)}$$

énergie HO = niveau de Fermi

qd T aug $\Rightarrow$ agitation thermique
 $\Rightarrow$ excitation des e^-

la pop P des orb correspond à une distrib^o de Fermi Dirac
 (variante de distrib^o de Boltzmann ms qui tient compte du
 principe de Pauli)

$$P = \frac{1}{e^{(E-\mu)/kT} + 1}$$

μ = pot chimiq = énergie par lequel $P = \frac{1}{2}$

$\rightarrow$ fig 4.1 - Reynal - enseefr

$T \uparrow \Rightarrow$ courbe élargie
 $\Rightarrow$ on vient peup^l des états @ haut
 en énergie.

c) Semi conducteur.

pi bande interdite $\sim 1\text{eV}$.

$\rightarrow$ Image des 3.

semi cond intrinsèques:

$\rightarrow$ Fig 20.55 p 727 Atkins.

$T \uparrow$ distrib^o Fermi Dirac change

semi conduction = prop de la structure de bande
 du solide pur. Si / Ge

Semi cond composé = solide = combi d'él^{im} $\neq$
 GaN, Cds

Semi cond extrinsèques: porteurs de charge viennent
 du remplacem^t de qq atome seulement par des
 atomes dopants

II 7 Dopage.

1 - Dopage n (influence s/ bande)

2) Dopage p. (" ")

III Energie de forma.

II 7 Dopage.

1) Definition

$\begin{matrix} -n \\ -p \end{matrix} \} \text{dopage.}$

2) Energie format des défauts p 365 Marucco

3) Conséquences sur diagramme de bande
p 379 - p 381 Marucco.

diag de bande / cond

④ T.