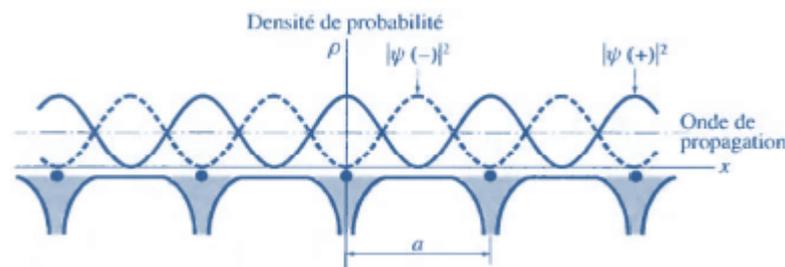


2-3 Apparition de la bande interdite :

Les fonctions d'onde Ψ^+ et Ψ^- (deux ondes stationnaires, solution l'équation de Schrödinger, voir le cours précédent) accumulent les électrons dans des régions placées différemment, c'est l'origine de la bande interdite.

Pour les électrons libres, la fonction d'onde est $\frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$, nous avons $\rho = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \cdot \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-ikx} = \frac{1}{L}$, la densité de charge est donc constante. Cette densité n'est pas constante pour des combinaisons linéaires d'ondes planes.

Pour l'onde Ψ^+ , nous avons $\rho^+ = |\Psi^+|^2 = \frac{2}{L} \cos^2 \frac{\pi}{a} x$, qui accumule les charges négatives au voisinage des ions positifs situés en $x = 0, a, 2a, \dots$ où l'énergie potentielle est minimale (voir figure). Par contre, pour la densité de charge, $\rho^- = |\Psi^-|^2 = \frac{2}{L} \sin^2 \frac{\pi}{a} x$ nous avons une répartition des électrons à mi-chemin entre les ions, c'est-à-dire loin des ions (voir figure).



Le potentiel périodique du réseau agit comme perturbation, qui a pour conséquence de lever la dégénérescence des états Ψ^+ et Ψ^- .

L'énergie potentielle est faible par rapport à l'énergie cinétique, et par l'application le théorème de perturbation, les énergies ΔE^+ et ΔE^- pour les états Ψ^+ et Ψ^- sont données par :

$$\begin{cases} \Delta E^+ = \int_0^L |\Psi^+|^2 u(x) dx \\ \Delta E^- = \int_0^L |\Psi^-|^2 u(x) dx \end{cases}$$

$u(x)$ est l'énergie potentielle dans le cristal est $u(x) = 2u \cos \frac{2\pi}{a} x < 0$.

Après intégration on obtient,

$$\begin{cases} \Delta E^+ = u < 0 \\ \Delta E^- = -u > 0 \end{cases}$$

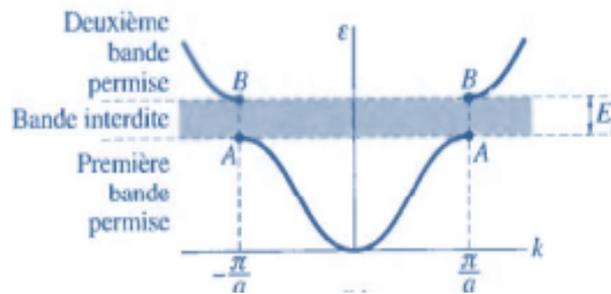
On remarque que l'énergie de l'état Ψ^+ diminue de $|u|$ par rapport à l'énergie non perturbée

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2.$$

de même, l'état Ψ^- augmente de $|u|$ par rapport à l'énergie non perturbée E_0 . La diminution et augmentation de l'énergie sont les conséquences de l'interaction électron-ions,

$$|\Delta E_{\pm}^+| = \frac{1}{2} E_g$$

avec, E_g est la bande interdite (eV)



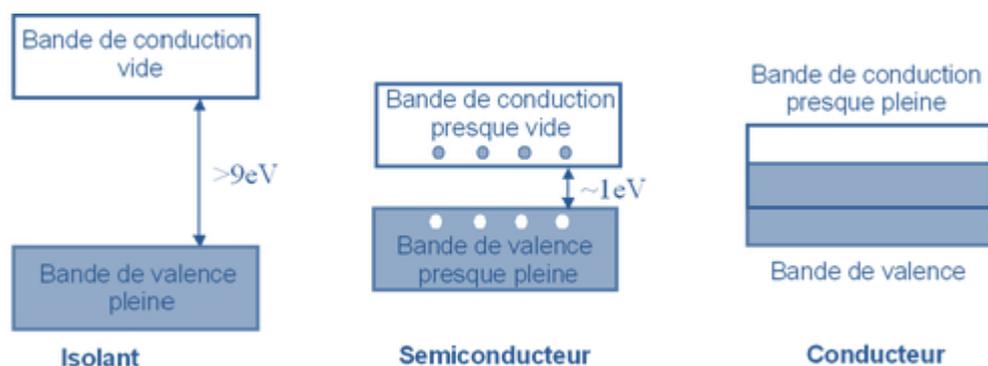
2-4 Isolant, semi-conducteur et conducteur :

Les matériaux solides peuvent être classés en 3 groupes, que sont les isolants, les semi-conducteurs et les conducteurs.

Les propriétés électriques d'un matériau sont fonction des populations électroniques des différentes bandes permises. La conduction électrique résulte du déplacement des électrons à l'intérieur de chaque bande. Sous l'action du champ électrique appliqué au matériau, l'électron acquiert une énergie cinétique dans le sens opposé au champ électrique.

Considérons à présent une bande d'énergie vide, il est évident de par le fait qu'elle ne contient pas d'électrons, elle ne participe pas à la formation d'un courant électrique. Il en est de même pour une bande pleine. En effet, cet électron ne peut se déplacer que s'il existe une place libre sa bande d'énergie.

Un matériau dont les bandes d'énergie sont vides ou pleines est un **isolant**.



Un **semi-conducteur** est un isolant pour une température de 0 K. cependant ce type de matériau ayant une énergie de gap (Bande interdite) plus faible que l'isolant ($\sim 1\text{eV}$), qui aura par une agitation thermique ($T=300\text{ K}$), une bande de conduction légèrement peuplée d'électrons et une bande de valence légèrement dépeuplées.

Pour un **conducteur**, l'interprétation des bandes de valence et de conduction implique qu'il n'existe pas d'énergie de gap. La bande de conduction est partiellement pleine (même aux basses températures) et ainsi la conduction du matériau est élevée.