

Série N° 4
(Structure électronique des solides : métaux et oxydes)

Exercice 1 :

Proposer un diagramme de bandes simplifié de l'alumine Al_2O_3 . Préciser les orbitales atomiques impliquées dans ce diagramme.

En déduire si le matériau est un conducteur ou un isolant électronique.

Al : 13 ; O : 8

Exercice 2 :

Établir un diagramme de bandes simplifié du dioxyde de silicium SiO_2 , dans lequel le silicium est localisé sur des sites tétraédriques.

Si : 14

Exercice 3 :

Établir le diagramme de bandes de la pérovskite LaCoO_3 , sachant que le cobalt est dans un environnement octaédrique. Est-il possible d'en déduire les propriétés électriques de ce matériau.

Co : 27

Notes :

Exercice 1 :

Aucune indication sur l'environnement de l'aluminium, donc, le diagramme énergétique s'effectue comme celui d'une molécule diatomique, mais en comptabilisant les O.A. de tous les atomes présents dans la formule ; double O.A pour Al et triple O.A pour l'O.

La deuxième considération est que les OA S et Pz de Al se recouvrent avec leur homologues de O pour donner des bandes σ_s et σ_p . Les O.A Px et Py des deux atomes sont convenablement orientées pour donner des bandes π_x et π_y .

Exercice 2 :

Le Si dans le SiO_2 est dans un environnement tétraédrique, et il n'est pas un élément de transition, donc Si a une hybridation sp^3 (4 orbitales hybrides), il fait ainsi, 4 liaisons σ avec les O.A S et Pz des deux oxygènes. Toutes les orbitales de valence de Si sont utilisées, mais

pour l'O, il reste les O.A Px et Py sans aucun recouvrement, donc, elles restent dans le SiO₂, O.M. non liantes.

Exercice 3 :

Dans la pérovskite, le Co est un élément de transition et il est dans un environnement octaédrique, donc, il faut prendre en considération l'éclatement des orbitales d en t_{2g} et e_g. Les bandes liantes sont à dominante anionique et les bandes anti-liantes sont à dominante cationique.

La nature du ligand ainsi que la structure électronique peuvent estimer les propriétés électriques de ce matériau.