

# PHYSIQUE DES SEMICONDUCTEURS

---

P. Lorenzini

Polytech'Nice Sophia

Dept. Électronique

# Objectifs du cours

- Comprendre l'intérêt des semi-conducteurs dans la fabrication des composants électroniques
- Maîtriser des mécanismes de transports électroniques et des phénomènes physiques régissant le fonctionnement des composants discrets de l'électronique.
- Maitriser le fonctionnement DC et AC de la jonction PN

# Plan du cours (18 h – 2 contrôles min)

1. Structure cristalline et cristallographie
2. Diffraction d'une onde par un cristal
3. mécanique quantique / ondulatoire : l'équation de Schrödinger
4. Les électrons quasi libres : le modèle de Sommerfeld
5. Les électrons dans une structure périodique : le modèle de Bloch – Brillouin
6. Courant dans les solides : cas particulier des semi-conducteurs  
mécanique statistique : la fonction de Fermi Dirac et la fonction de Maxwell – Boltzmann
7. Semi-conducteur à l'équilibre
8. Dopage des semi-conducteurs
9. Semi-conducteur hors équilibre: courant dans les semi-conducteurs  
Jonction PN

# Références bibliographiques

- C. Kittel, « physique de l'état solide », dunod université, 5° ed., 1983
- H. Mathieu, « Physique des semiconducteurs et des composants électroniques », dunod, 5° ed., 2004
- J. Singh, « semiconductors devices: an introduction », Mc.Graw Hill, 1994
- D.A.Neamen, « semiconductor physics and devices: basic principles », Mc.Graw Hill, 2003
- Cours de Physique des semiconducteurs, Pr. Rouzeyre, Université de Montpellier II, 1985
- McMurry and Fay, « Chemistry », Prentice Hall; 4th edition (April 7, 2003) ( les figures du chapitre 1 proviennent majoritairement de cet ouvrage)

# CHAPITRE 1

---

Liaison cristalline et cristallographie

# structure cristalline et cristallographie

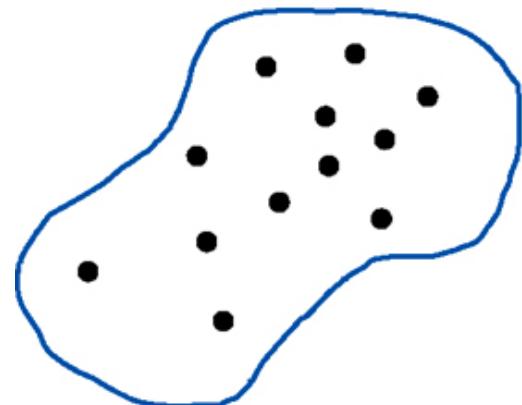
- États cristallin et amorphe
- Liaisons cristallines
- Géométrie des cristaux
- Diffraction cristalline - Réseau réciproque

# États cristallin et amorphe

- amorphe  $\Leftrightarrow$  verre
- cristalin  $\Leftrightarrow$  quartz,  $\text{SiO}_2$
- Distinction:
  - Au niveau macroscopique:
    - Si on élève la température du verre, on observe un passage progressif de l'état solide à l'état de liquide sans palier.
    - Pour un cristal, on observe un palier de température dû à une coexistence (changement) de phase.
  - Au niveau microscopique:
    - Amorphe : répartition aléatoire des atomes
    - Cristalin : répartition périodique dans l'espace des atomes.

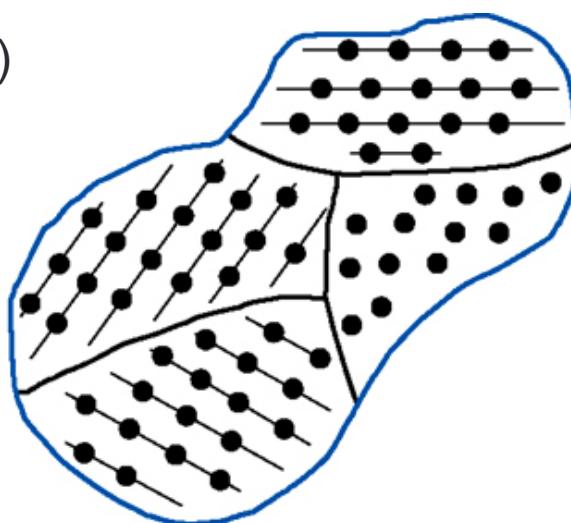
# États cristallin et amorphe

(D'après Neamen)



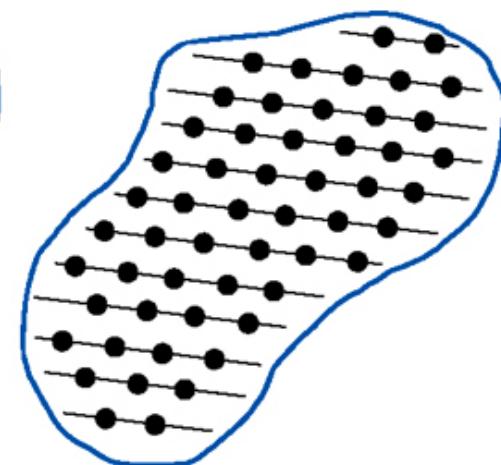
(a)

*Amorphe  
(pas d'ordre)*



(b)

*Polycristallin  
(ordre à courte portée)*



(c)

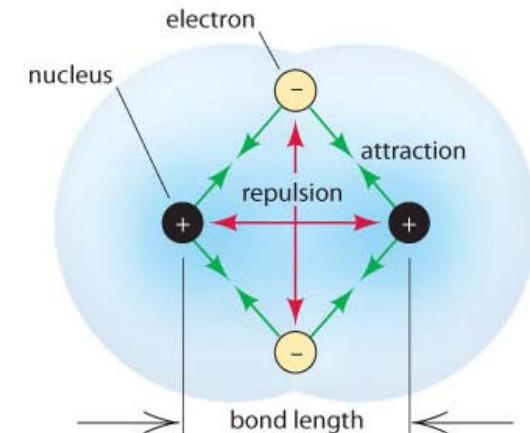
*Cristallin  
(ordre à longue portée)*

# La liaison cristalline

- Quelles sont les forces qui permettent aux atomes de se lier entre eux et de former telles ou telles structures?

$$\text{Le but : } U_{cristal} - U_{libre} < 0$$

- Plusieurs paramètres/effets à prendre en compte:
  - Garder les ions chargés positivement éloignés les uns des autres
  - Garder les électrons chargés négativement éloignés les uns des autres
  - Garder les électrons proches des ions
  - Minimiser l'énergie cinétique des électrons en les répartissant

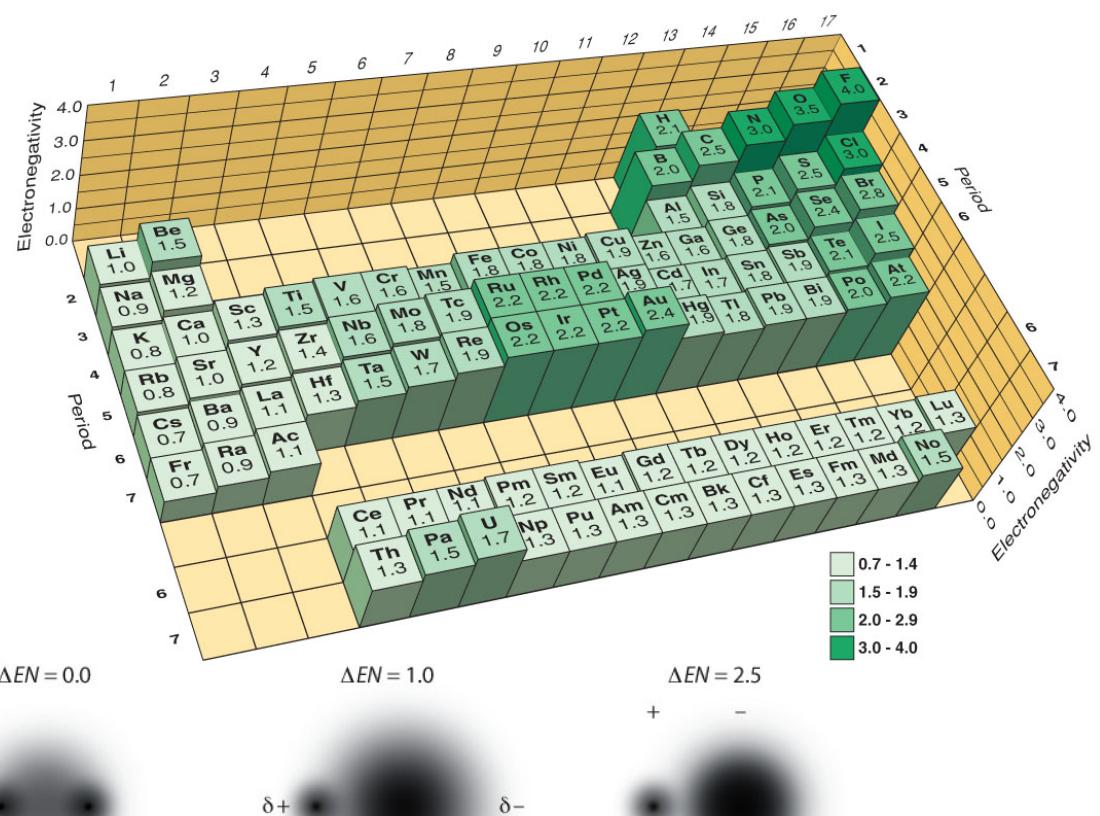


# Electronégativité

- **Electronegativité:** c'est la capacité d'un atome à attirer les électrons mis en commun dans une liaison chimique.

La différence d'électronégativité  $\Delta EN$  entre deux atomes liés peut être nulle, faible ou grande.

- $\Delta EN \sim 0$ : les électrons sont également répartis
- $\Delta EN \sim 1$ : les électrons sont plus proches de l'atome le plus électronégatif.
- $\Delta EN$  est élevée, les électrons sont peu partagés (pas mis en commun)



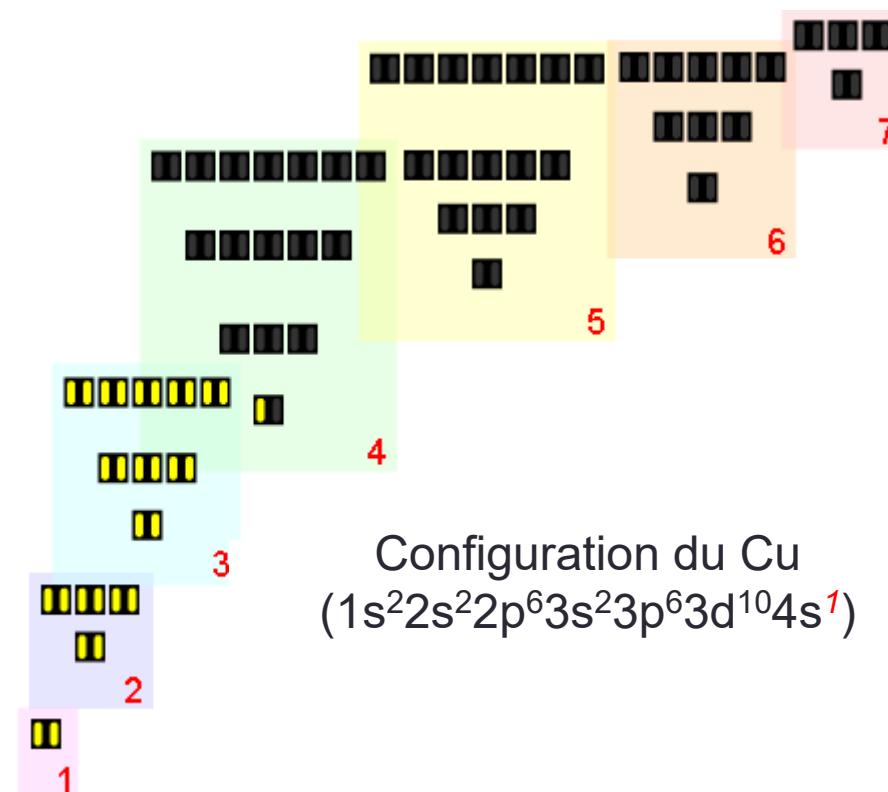
# La liaison cristalline

- 4 principaux types:
  - Liaison métallique
  - Liaison covalente
  - Liaison ionique
  - Liaison de Van der Waals (gaz rares) ou liaison moléculaire
- Un point commun:
  - Les atomes essayent d'avoir leur dernière couche électronique vide ou complète !

# La liaison métallique

- La majorité des éléments chimiques ont un comportement métallique plus ou moins marqué.
- Construite à partir d'éléments ayant peu d'électrons de valence /à leur période ou niveau d'énergie
- Exemple:
  - Sodium (Na)  $\Leftrightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$
  - Cuivre (Cu)  $\Leftrightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$

# La liaison métallique : le cuivre



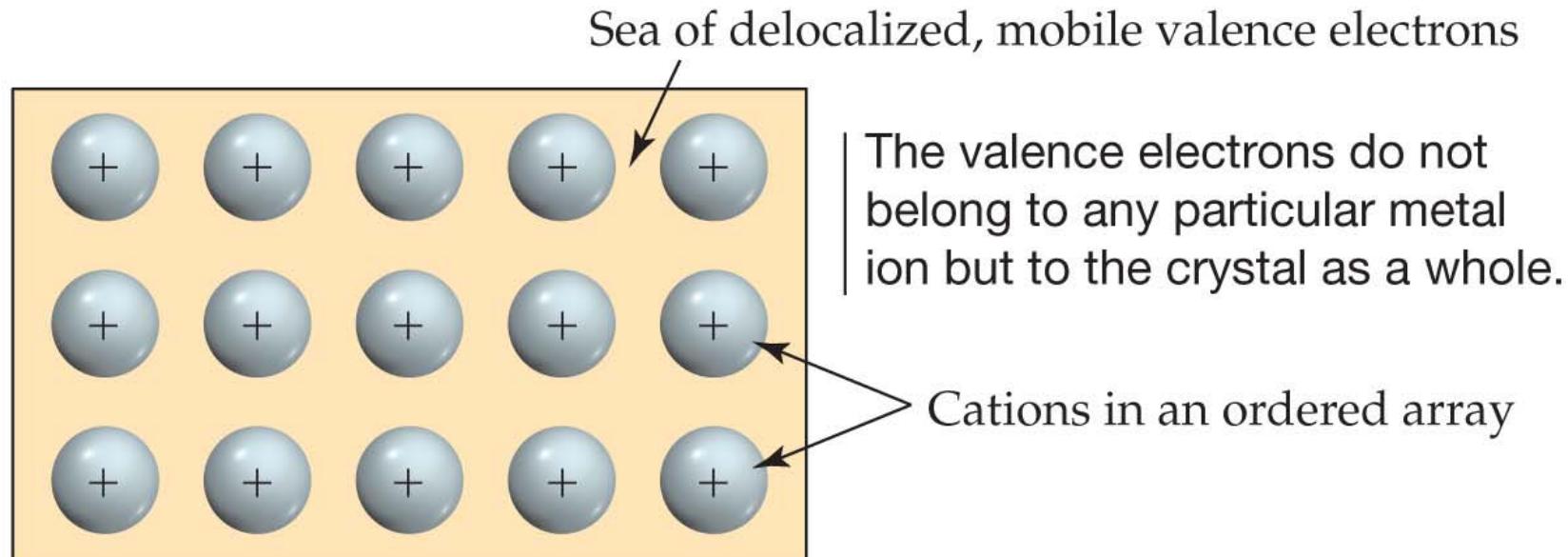
# La liaison métallique

- Les électrons périphériques sont très peu liés à l'atome
- L'atome « libère » facilement ce(ces) électron(s)
- Les noyaux constituent alors un ensemble de charges positives ⇔ ions positifs à couche externe saturée
- La cohésion est assurée par le nuage électronique chargé négativement
- Force de cohésion ⇔ attraction Coulombienne
- Liaisons « plutôt » faibles ⇔ matériaux moins durs et fusion à basse Température

1	2	Melting Points of Metals (°C)												13
<b>Li</b>	<b>Be</b>	180.5	128.7											<b>Al</b>
97.794	650	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	660.32		
K	<b>Ca</b>	<b>Sc</b>	<b>Ti</b>	<b>V</b>	<b>Cr</b>	<b>Mn</b>	<b>Fe</b>	<b>Co</b>	<b>Ni</b>	<b>Cu</b>	<b>Zn</b>	<b>Ga</b>		
63.38	842	1541	1668	1910	1907	1246	1538	1495	1455	1084.6	419.53	29.77		
Rb	<b>Sr</b>	<b>Y</b>	<b>Zr</b>	<b>Nb</b>	<b>Mo</b>	<b>Tc</b>	<b>Ru</b>	<b>Rh</b>	<b>Pd</b>	<b>Ag</b>	<b>Cd</b>	<b>In</b>		
39.30	777	1522	1854.7	2477	2623	2157	2334	1964	1554.8	9612.2	321.1	156.6		
<b>Cs</b>	<b>Ba</b>				<b>W</b>		<b>Os</b>		<b>Pt</b>	<b>Au</b>	<b>Hg</b>			
28.44	727				3422		3033		1768.2	1064.2	-38.83			

# Metallic bond

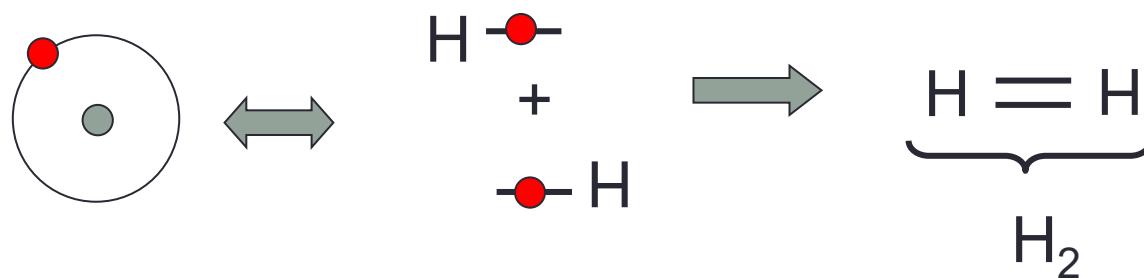
**Electron-Sea Model:** A metal crystal is viewed as a three-dimensional array of metal cations immersed in a sea of delocalized electrons that are free to move throughout the crystal.



# La liaison covalente

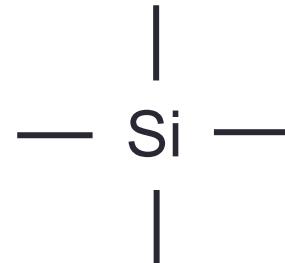
- Les cristaux appartiennent à la colonne IV du tableau périodique
- Liaison du même type que la liaison hydrogène
- L'Hydrogène:
  - 1 électron périphérique
  - Pour compléter sa couche, il accepterait « bien » un deuxième électron
  - Un deuxième atome d'H va permettre de mettre en commun leur électron périphérique
  - On obtient la molécule  $H_2$

3A	4A	5A	6A	7A	He
5 B $2s^2 2p$	6 C $2s^2 2p^2$	7 N $2s^2 2p^3$			
13 Al $3s^2 3p$	14 Si $3s^2 3p^2$	15 P $3s^2 3p^3$			
31 Ga $4s^2 4s^2 4p$	32 Ge $4s^2 4p^2$	33 As $4s^2 4p^3$			
49 In $5s^2 5s^2 5p$	50 Sn $5s^2 5p^2$	51 Sb $5s^2 5p^3$			
81 Tl $6s^2 6s^2 6p$	82 Pb $6s^2 6p^2$	83 Bi $6s^2 6p^3$			
114 Unknown	114 Unknown	114 Unknown			

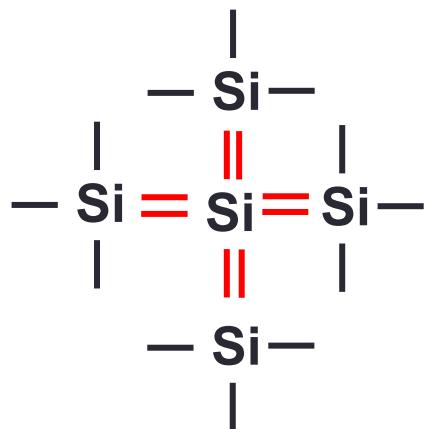


# La liaison covalente

- Exemple : le Silicium
  - 4 électrons de valence



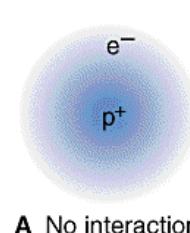
- Il « manque » 4 électrons de valence pour compléter sa couche externe
- Il suffit de « rapprocher » 4 autres Silicium



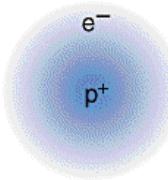
À la différence de  $\text{H}_2$ , une fois les liaisons saturées, les 4 autres Si ont encore des liaisons « pendantes » ⇔ ce processus peut continuer ⇔ on forme alors un cristal.

# La liaison covalente

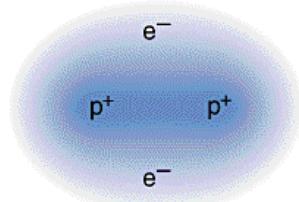
- Énergie plus faible si les électrons se « baladent » autour des 2 noyaux
- On peut obtenir le même type de résultats avec des composés II-VI ou encore III-V.(voir la suite)



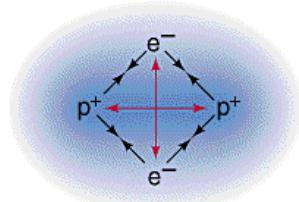
A No interaction



B Attraction begins



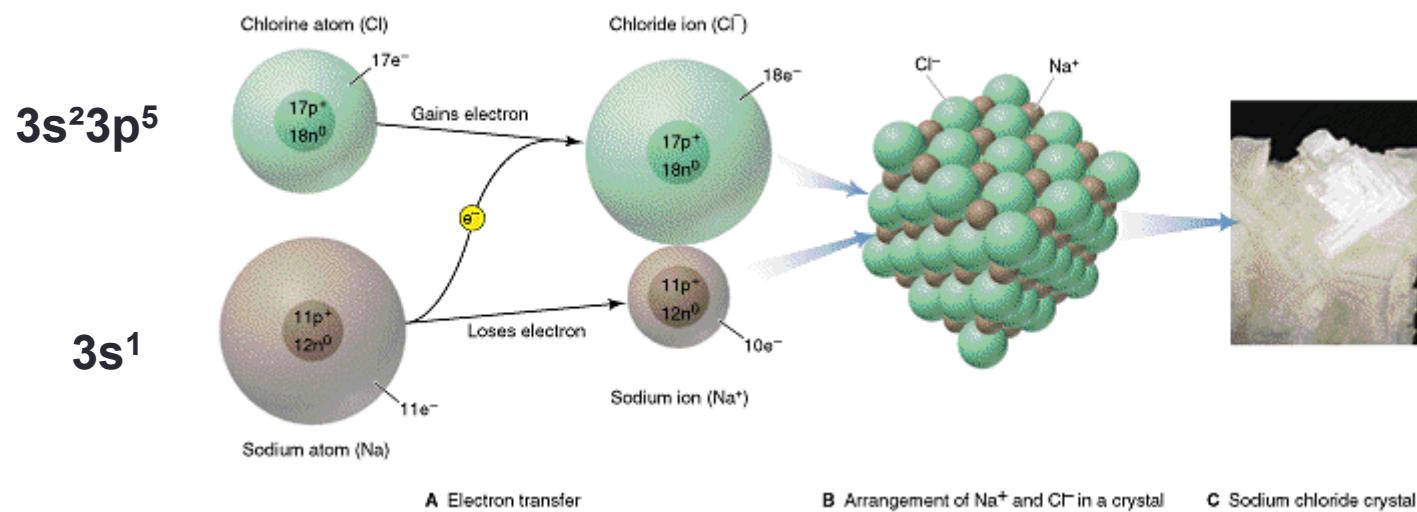
C Covalent bond



D Combination of forces

# Liaison ionique

- Association d'un élément chimique fortement électronégatif ( $7e^-$ ) et d'un élément fortement électropositif ( $1e^-$ ): ex NaCl
- L'électronégatif accepte un  $e^-$  et devient un ion négatif ( $Cl^-$ ), l'électropositif cède son  $e^-$  et devient un ion positif ( $Na^+$ )



(D'après McMurry and Fay)

# Liaison ionique

- La force de cohésion est due à l'attraction Coulombienne des deux ions  $\Leftrightarrow$  liaison ionique
- En fait, liaison « identique » à la liaison covalente sauf que les atomes sont très différents (pas la même colonne)
- La frontière covalente/ionique n'est pas brutale: dépend de la nature électronique des éléments associés
  - Col I – VII  $\Leftrightarrow$  essentiellement ionique
  - Col II-VI  $\Leftrightarrow$  80% ionique 20% covalente (CdTe)
  - Col III-V  $\Leftrightarrow$  60% ionique 40% covalente (GaAs, GaP, InP)
  - Col IV-IV  $\Leftrightarrow$  essentiellement covalente (Si, Ge)

# Liaison ionique

- L'électron libéré par le métal Alcalin (Na) est piégé par l'Halogène (Cl)
- Aucun électron libéré dans le réseau
- En général les cristaux ioniques sont **isolants**
- Liaison entre atomes très forte  $\Leftrightarrow$  cristaux très durs

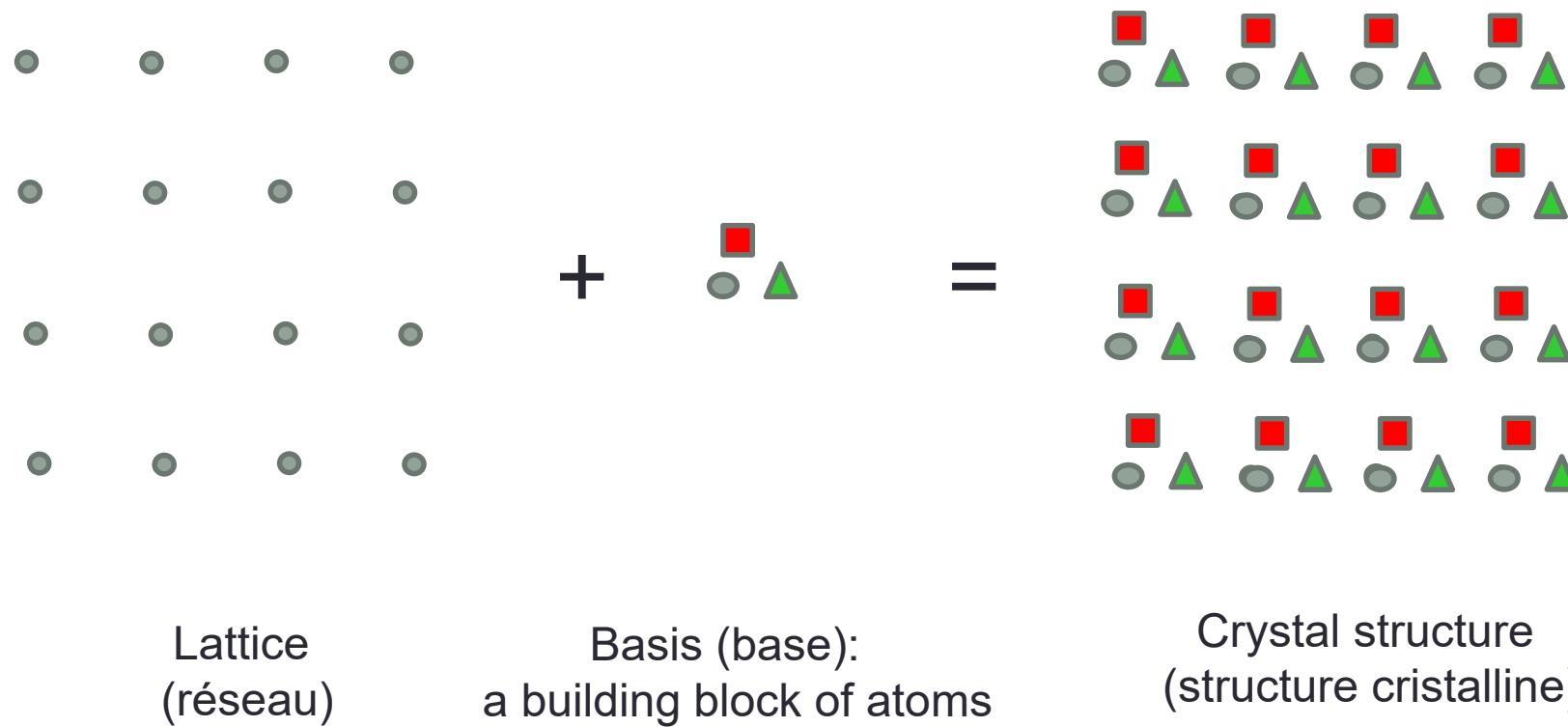
# Liaison de type Van der Waals

- Ceux sont les cristaux les plus simples
- La distribution électronique = atome libre
- Couches électroniques déjà saturées (col. VIII)
- Les atomes s'empilent de façon la plus dense possible
- Énergie de liaison très faible (qq % de l'énergie d'ionisation de l'atome)  $\Leftrightarrow$  cristaux fondent à basse température
- Responsable de la cohésion des molécules

# Géométrie des cristaux

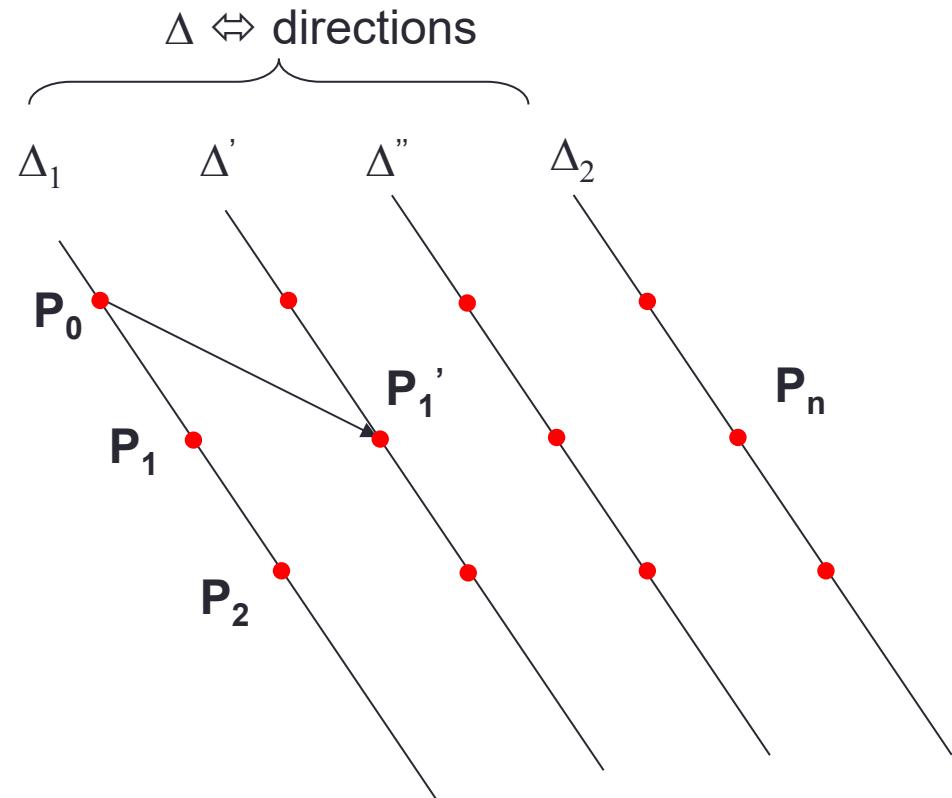
- Un cristal est constitué par la répétition périodique d'un **motif** cristallin: c'est la **base** du réseau.
    - pour le Silicium, Ge base : 1 seul atome
    - Pour le GaAs base : 2 atomes
    - Pour un crist. moléculaire base : Protéine  $10^4$ - $10^5$  at.
  - On décrit la structure périodique par un réseau: **le réseau cristallin**
  - À 2 Dim: Réticule (net)  $\Leftrightarrow$  réseau plan
  - À 3 Dim: Réseau (Lattice )  $\Leftrightarrow$  réseau 3D

# Géométrie des cristaux



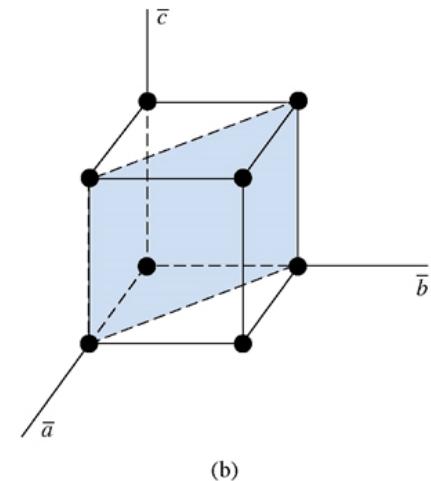
# Géométrie des cristaux

- Postulat de Bravais: il existe dans le cristal un ensemble de points  $P_n$  qui ont exactement le même environnement microscopique que  $P_0$  (le pt origine) ie que le paysage atomique vu de  $P_n$  est le même qu'en  $P_0$  en grandeur **et** en direction. Cet ensemble de points est un ensemble de points congruents ou sommet du réseau
- Réseau de Bravais: c'est un échantillon de réseau qui montre toutes les translations du réseau. Il y en a 14 différents

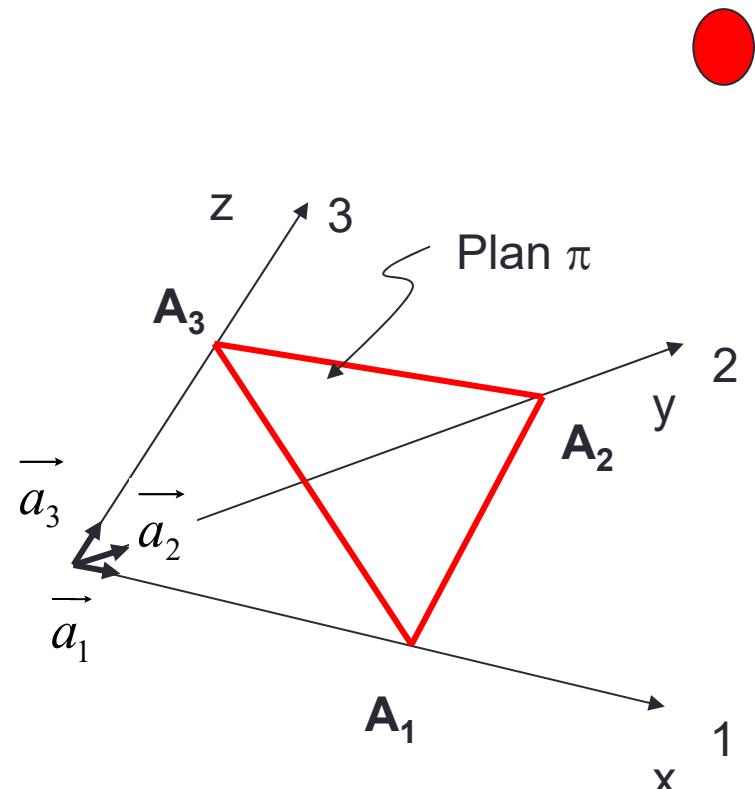


# Repérage des plans cristallins

- Repérage des plans cristallins: les nœuds du réseau peuvent être regroupés sur des ensembles de plans // et équidistants: **les plans réticulaires** ( dans notre cas, les plans qui contiennent les atomes du réseau)
- Méthode :
  - coordonnées des intersections des plans avec les directions cristallines
    - $x_1$  (distance / origine =  $x_1.a$ ) en unité de  $a$
    - $x_2$  (distance / origine =  $x_2.b$ ) en unité de  $b$
    - $x_3$  (distance / origine =  $x_3.c$ ) en unité de  $c$
  - Prendre les inverses
  - Prendre les plus petits entiers dans le même rapport
  - Exemple:
    - $x_1=4, x_2=1, x_3=2$
    - $\frac{1}{4}, 1, \frac{1}{2}$
    - $1,4,2$
$$(h,k,l) = (1,4,2)$$
  - **Nota : si un des indices est négatif, on ajoute une barre sur le dessus**  $\bar{h}$
  - $h,k,l$  constituent **les indices de Miller**



# Plan cristallin d'indices (h,k,l)



- $A_1, A_2, A_3 : 3$  nœuds  $\Leftrightarrow$  plan réticulaire  $\pi$  d'indices (hkl).

$$\overline{OA_i} = p_i \overline{a_i}$$

Valeurs de  $p_1=?$ ,  $p_2=?$ ,  $p_3=?$

- Équation d'un plan:

$$Ax + By + Cz = 1$$

- Soit encore:

$$h \frac{x}{a_1} + k \frac{y}{a_2} + l \frac{z}{a_3} = 1$$

En utilisant les indices de Miller, on arrive (coord. numériques) à :  $hx + ky + lz = N$   
. Si  $N=2$ , le plan  $\pi$  est le 2° plan d'indices (h,k,l) après l'origine

# Plan cristallin d'indices (h,k,l)

- Un plan réticulaire (hkl) est défini par une équation:

$$hu + kv + lw = s$$

u,v,w entiers quelconques  
 h,k,l entiers premiers entre eux  
 u,v,w coordonnées numériques  
 des nœuds

- Coordonnées vraies  $x = u|\vec{a}|$  donc  $u = \frac{x}{a}$

$$h\frac{x}{a} + k\frac{y}{b} + l\frac{z}{c} = s$$

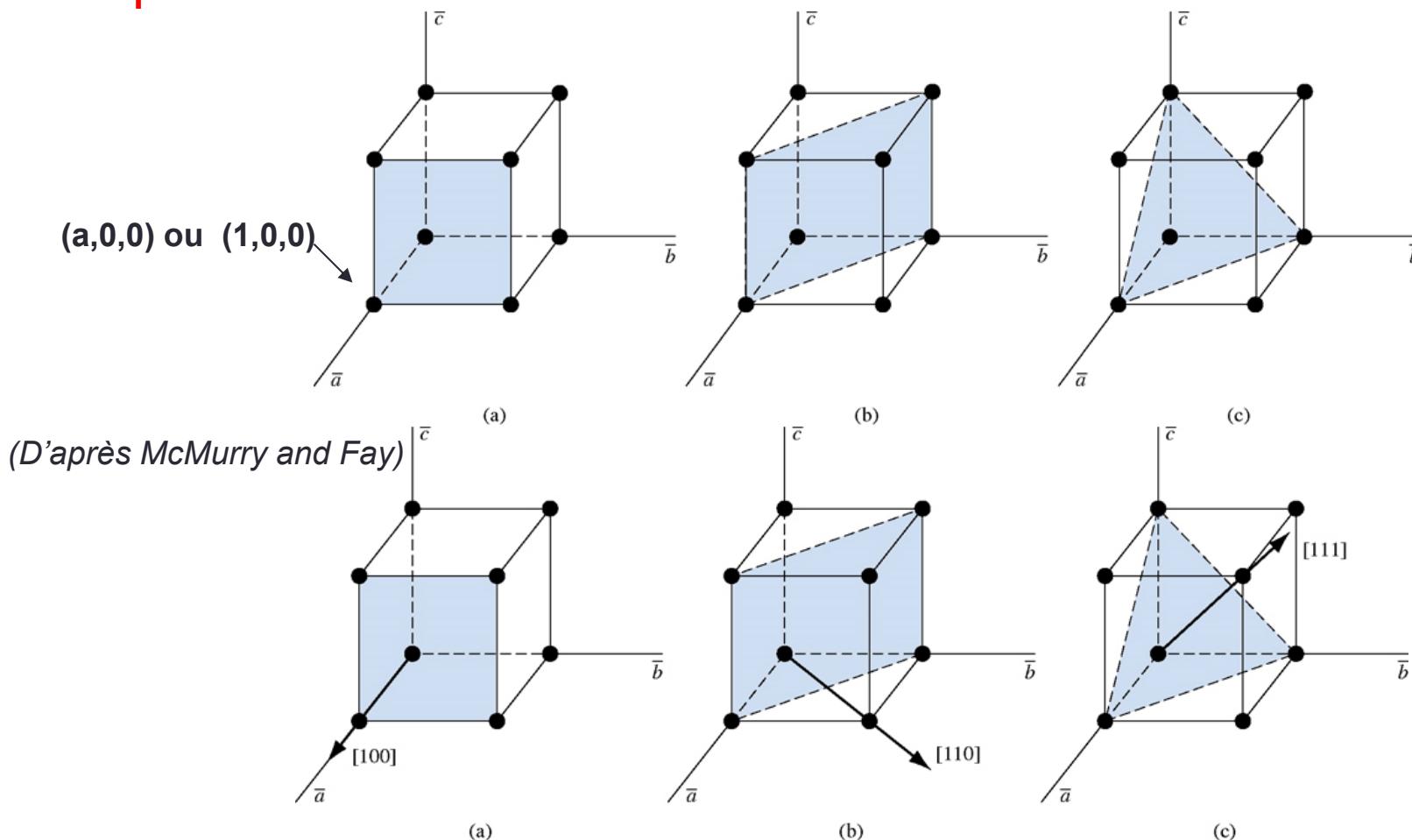
- Ce polynome peut prendre toutes les valeurs entières successives <0,>0 et 0, ie  $s < 0, > 0$  et 0
  - $s=0 \Leftrightarrow$  plan passant par l'origine
  - $s=N \Leftrightarrow$  plan coupant x en ?, y en ?, z en ?
  - Exemple : plan qui coupe x en  $3a$ , y en  $2b$ , z en  $2c \Leftrightarrow$  équation du plan?

# Directions cristallines

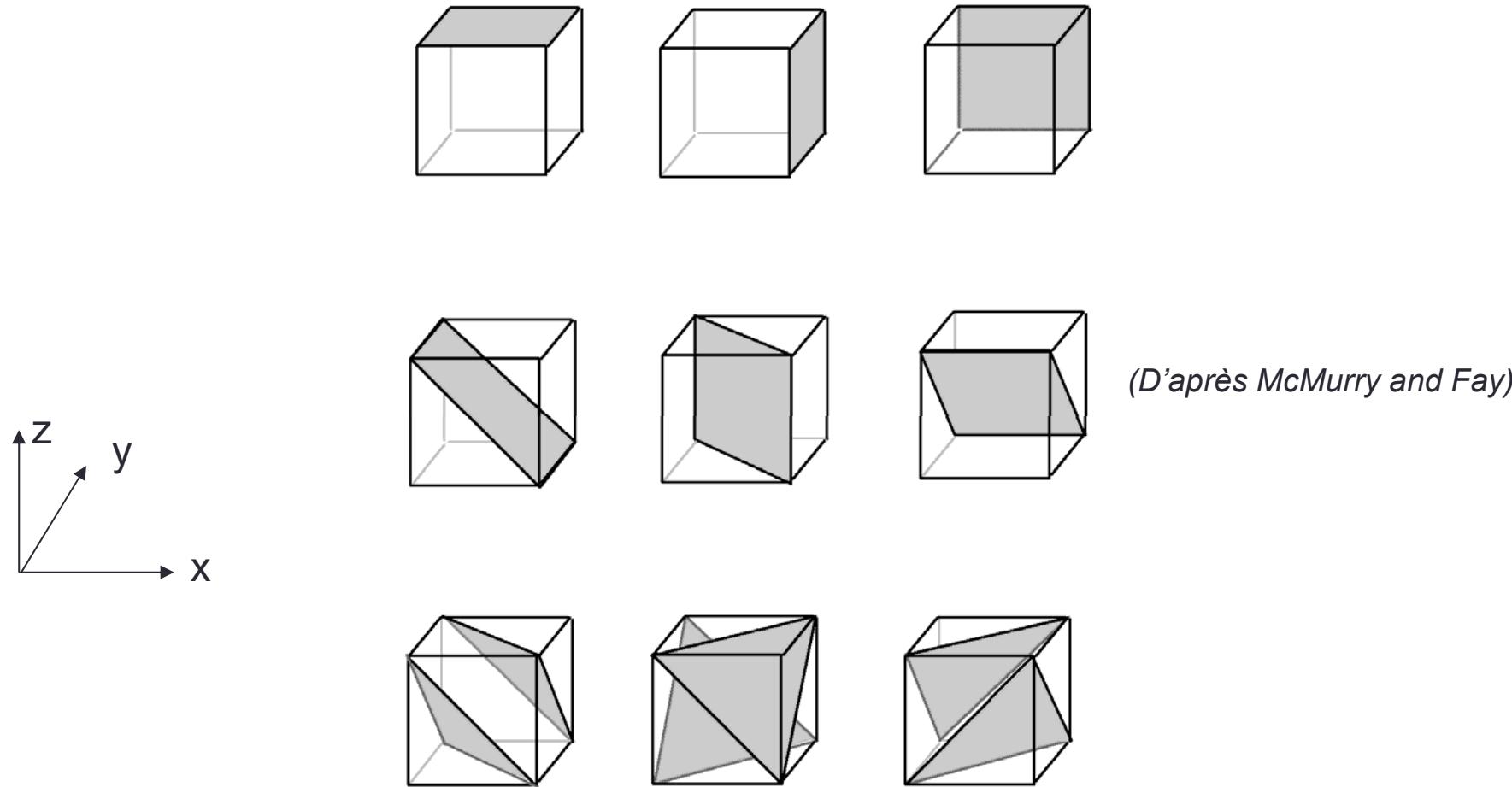
- Toute droite passant par 2 nœuds du réseau définit une **direction cristalline**. On peut la repérer par trois indices  $h,k,l$  plus petits entiers ayant même rapport entre eux que les composantes d'un vecteur colinéaire à la droite.
- Notation:  $[h,k,l]$
- Cas particulier: une direction  $[h,k,l]$  est orthogonale au plan de même indices  $(h,k,l)$  ou encore  $[h,k,l]$  est le vecteur axial du plan  $(h,k,l)$  .

# Indices de Miller (suite)

- Permet de définir des **directions cristallines** et l'orientation de **plans cristallins**:

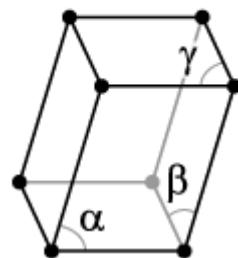


# Exemples de plans dans un cristal cubique.



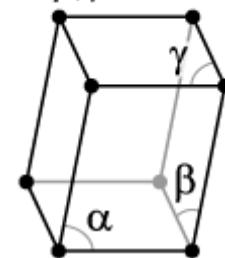
# Les différentes structures cristallines

$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$



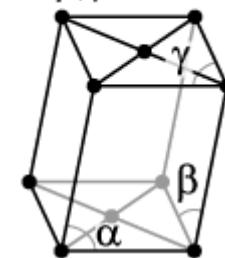
Triclinique

$\alpha \neq 90^\circ$   
 $\beta, \gamma = 90^\circ$



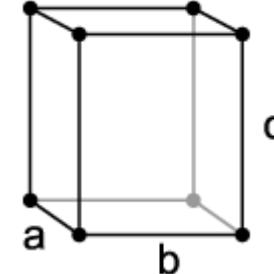
Monoclinique

$\alpha \neq 90^\circ$   
 $\beta, \gamma = 90^\circ$



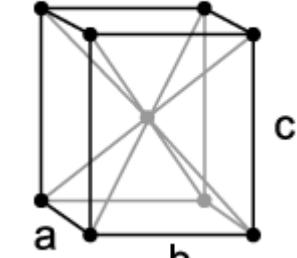
Monoclinique  
centré

$a \neq b \neq c$



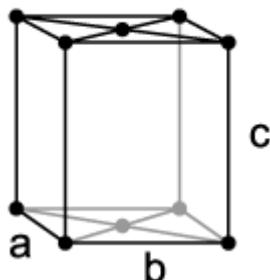
Orthorhombique

$a \neq b \neq c$



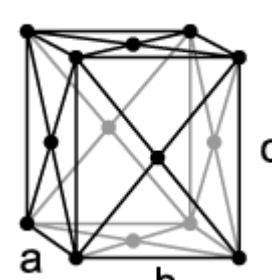
Orthorhombique  
centré

$a \neq b \neq c$



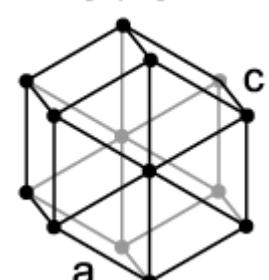
Orthorhombique  
base centrée

$a \neq b \neq c$



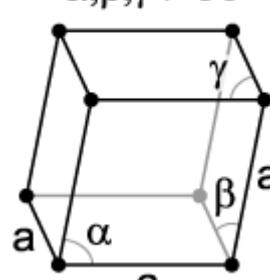
Orthorhombique  
faces centrées

$a \neq c$



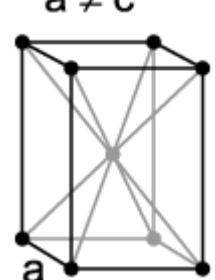
Hexagonal

$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$



Rhomboédrique

$a \neq c$



Tétragonal

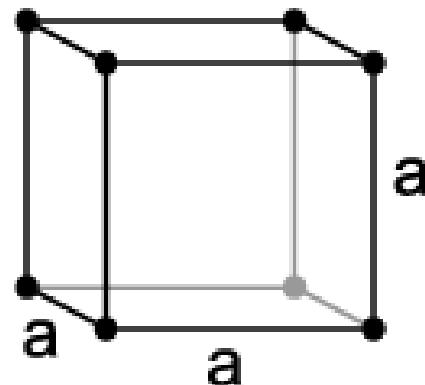
$a \neq c$   
↑  
Tétragonal  
centré

$\uparrow$

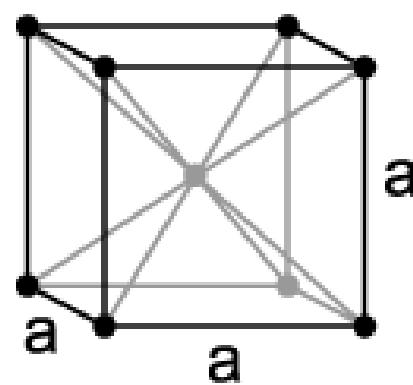
$a \neq c$

$a \neq c$

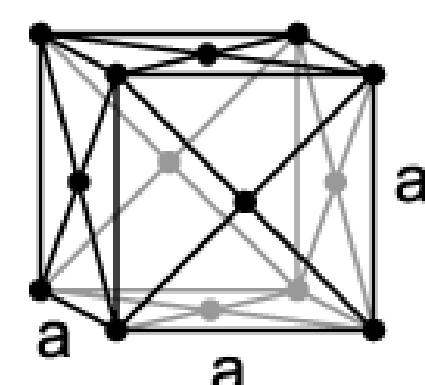
# Les différentes structures cristallines



Cubique simple  
(cs)



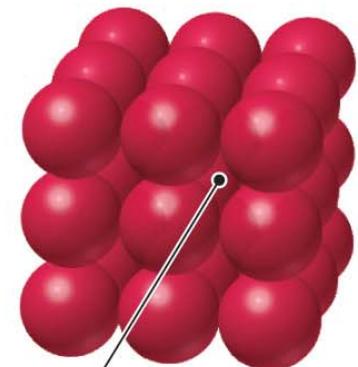
Cubique centré  
(cc)



Cubique faces centrées  
(cfc)

# Les différentes structures cristallines: notion de multiplicité de la maille

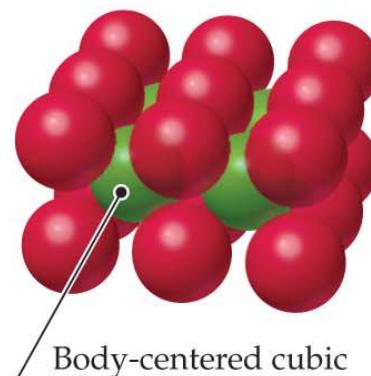
**(a)** In simple cubic packing, all **layers are identical** and all atoms are lined up in stacks and rows.



Simple cubic

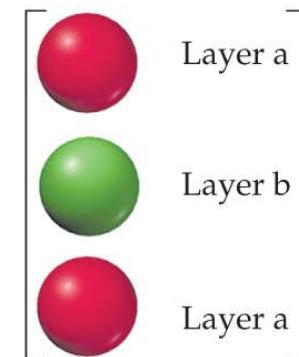
Coordination number 6:  
Each sphere is touched by six neighbors, four in the same layer, one directly above, and one directly below.

**(b)** In body-centered cubic packing, the spheres in **layer a** are separated slightly and the spheres in **layer b** are offset so that they fit into the depressions between atoms in layer a. The third layer is a repeat of the first.



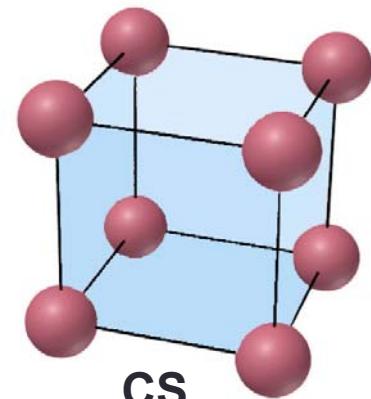
Body-centered cubic

Coordination number 8:  
Each sphere is touched by eight neighbors, four in the layer below, and four in the layer above.

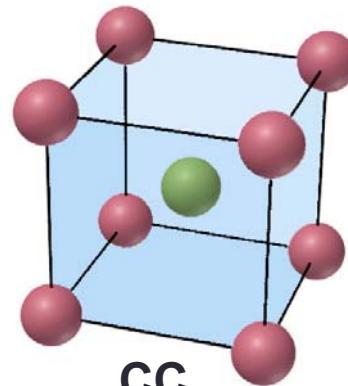


(D'après McMurry and Fay)

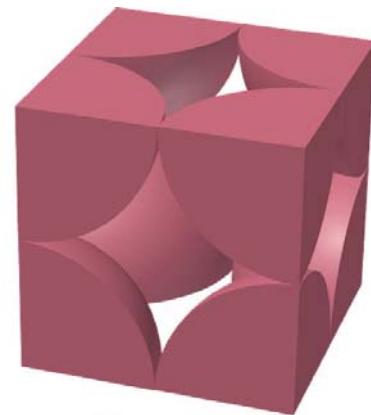
## Les différentes structures cristallines: notion de multiplicité de la maille



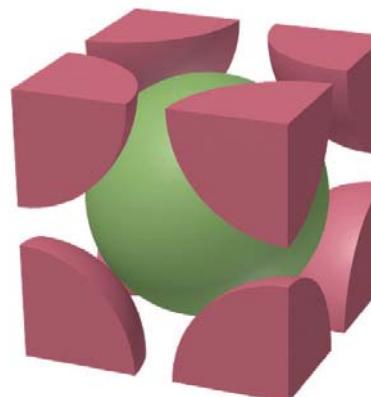
CS



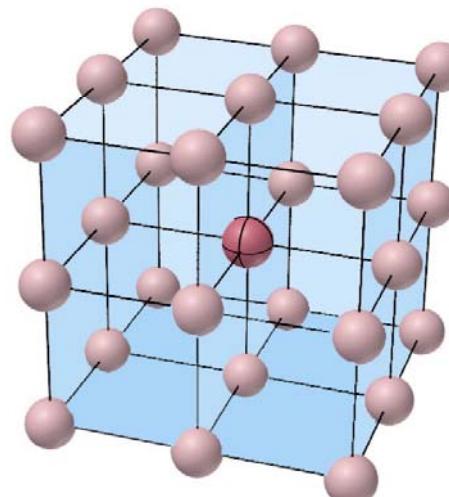
CC



(a)



(b)



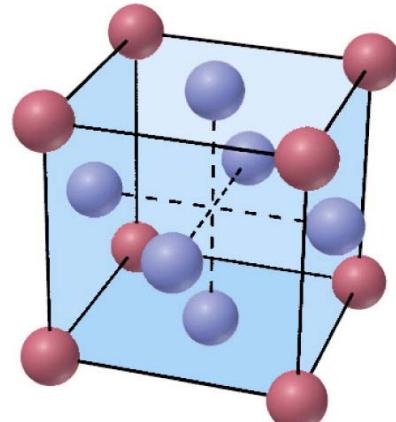
(c)

1 atome (nœud)  
par maille

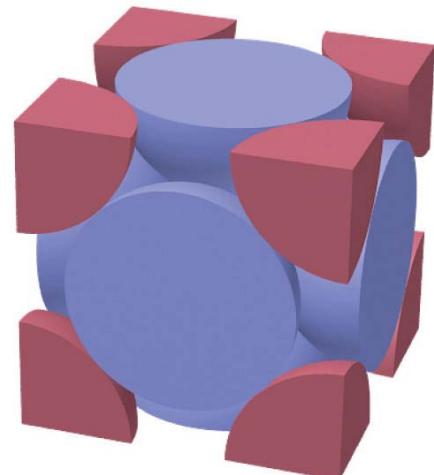
2 atomes (nœuds)  
par maille

(D'après McMurry and Fay)

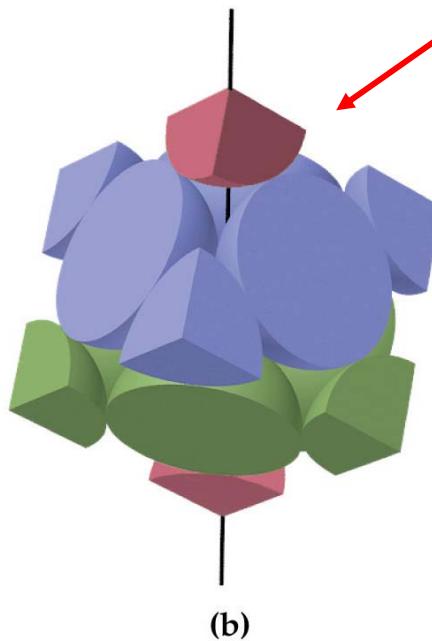
## Les différentes structures cristallines: notion de multiplicité de la maille



CFC



4 atomes (nœuds)  
par maille

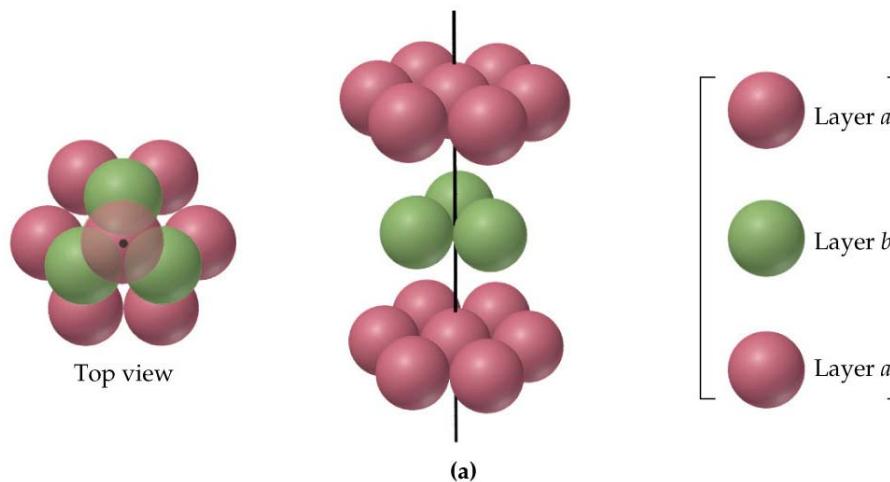


Les faces sont inclinées de  
54,7° par rapport aux 3  
couches atomiques qui se  
répètent

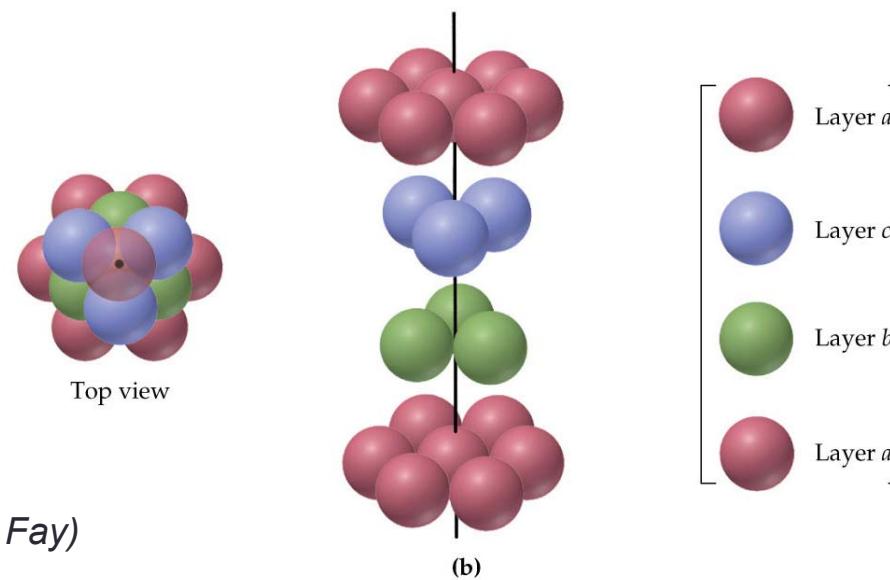
(D'après McMurry and Fay)

## Les différentes structures cristallines: notion de multiplicité de la maille

### Structure Hexagonale



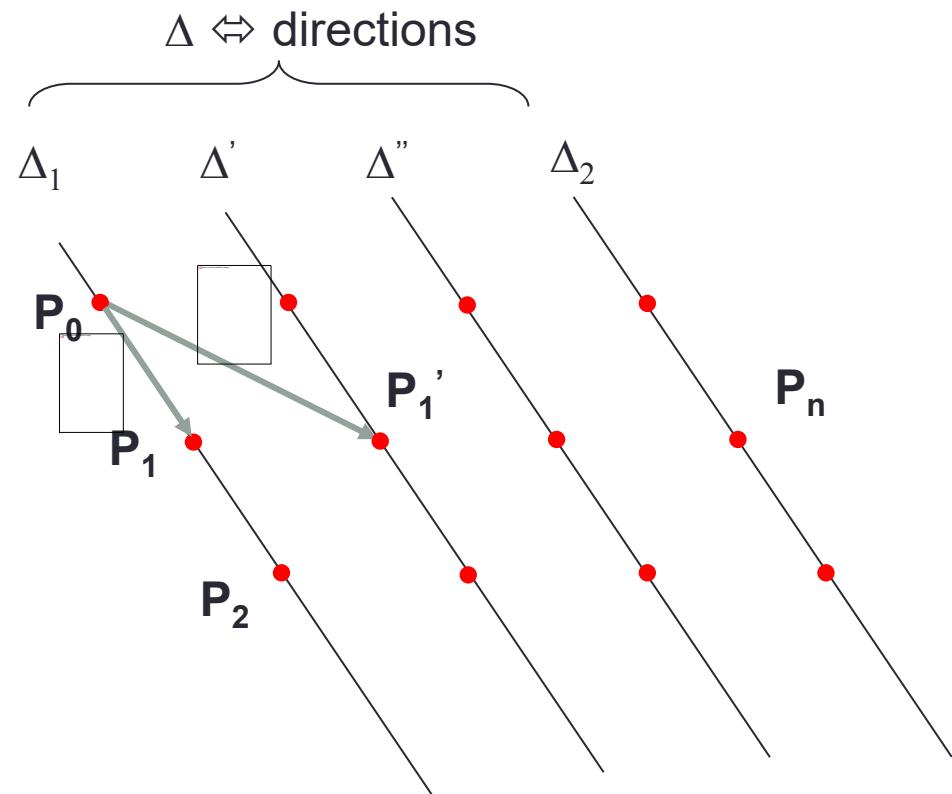
### Structure Cubique Faces Centrées



(D'après McMurry and Fay)

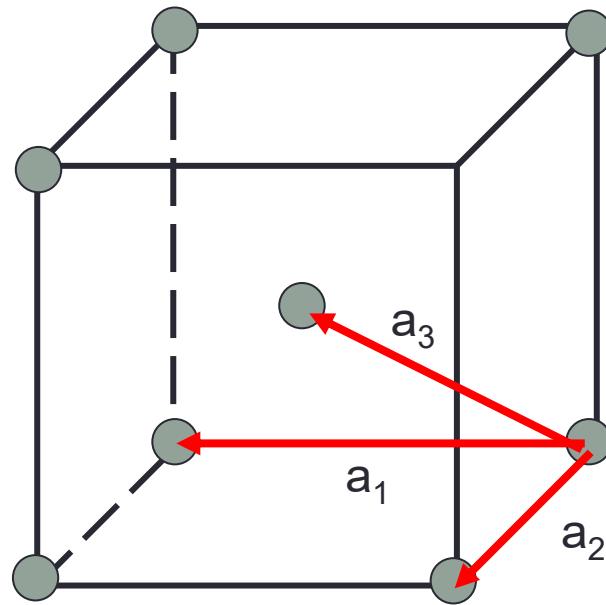
# Choix des vecteurs primitifs

- Pas unique
- Méthode:
  - $a_1$  doit être la période la plus courte du réseau
  - $a_2$  doit être la période la plus courte du réseau non // à  $a_1$
  - $a_3$  doit être la période la plus courte du réseau non coplanaire avec  $a_1$  et  $a_2$



*On obtient alors une **cellule primitive***

# Le Cubique centré (cc)

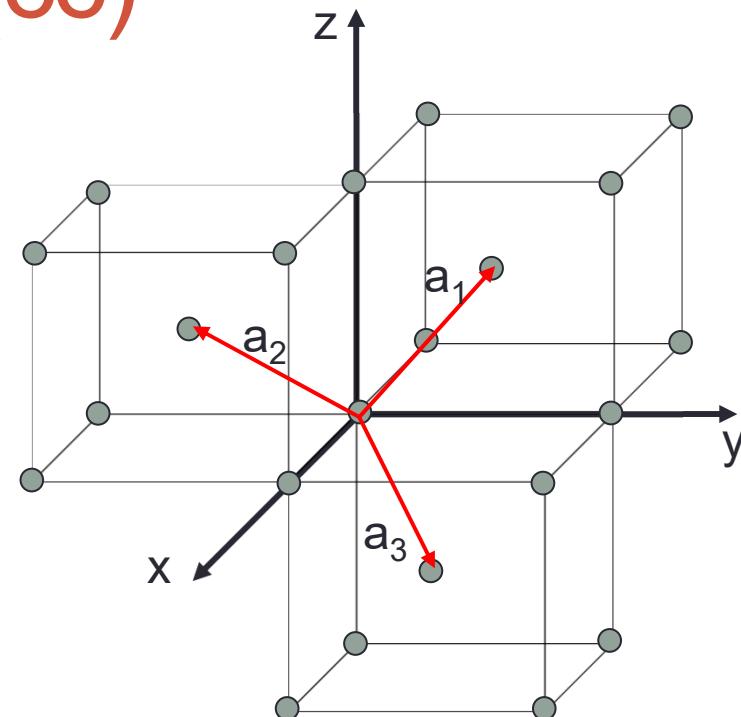


$$\vec{a}_1 = a \vec{x}$$

$$\vec{a}_2 = a \vec{y}$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2} (\vec{x} + \vec{y} + \vec{z})$$

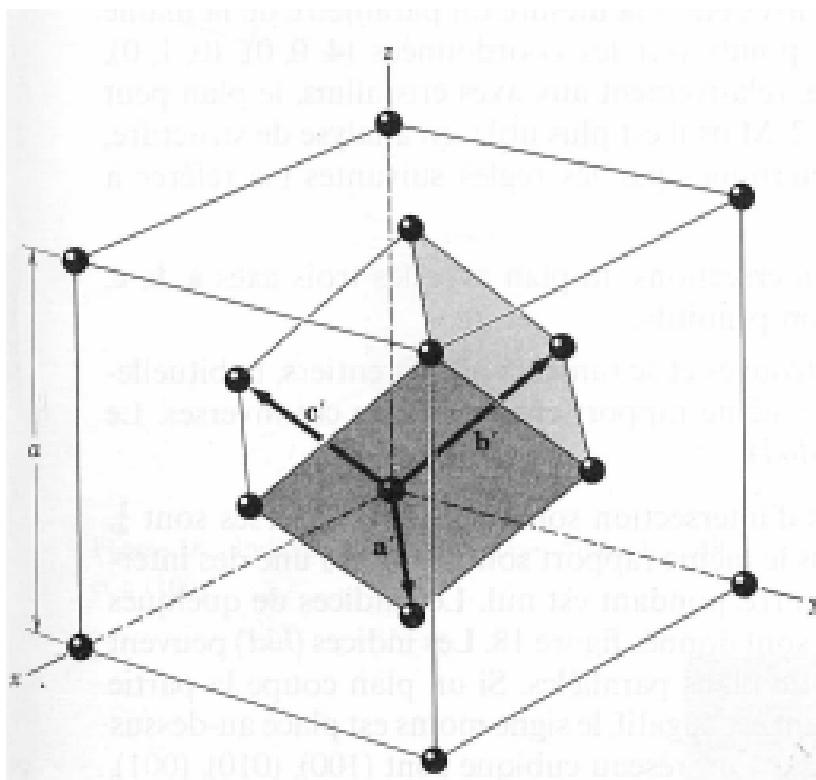
Ou:



$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} (-\vec{x} + \vec{y} + \vec{z})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2} (\vec{x} - \vec{y} + \vec{z})$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2} (\vec{x} + \vec{y} - \vec{z})$$



**Figure 15** Maille élémentaire rhomboédrique d'un cristal cubique à faces centrées. Les vecteurs de translation fondamentaux  $a'$ ,  $b'$ ,  $c'$  relient un sommet aux centres des faces. Ces vecteurs sont

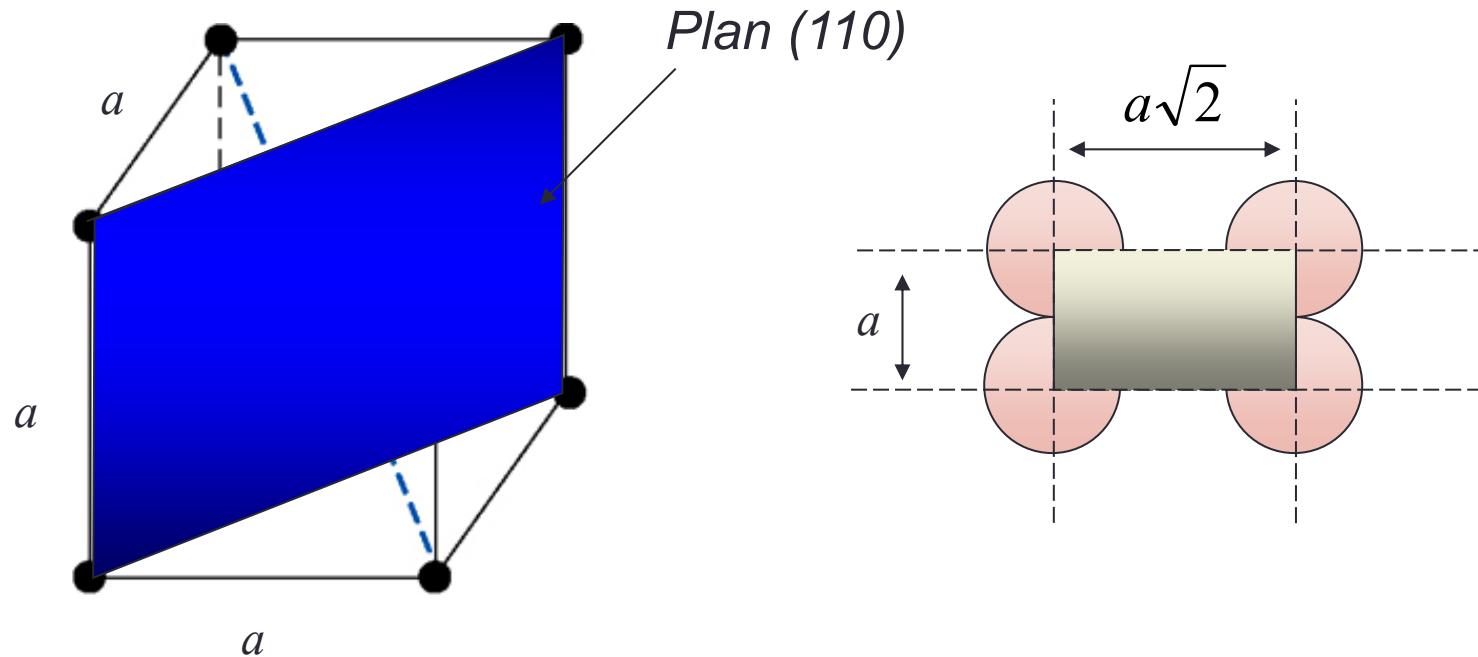
$$a' = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y}); \quad b' = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z});$$

$$c' = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{z}).$$

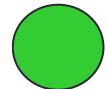
Ils sont séparés par des angles de  $60^\circ$ .

D'après C. Kittel, Dunod, 5<sup>e</sup>ed.

# Densité surfacique d'atomes

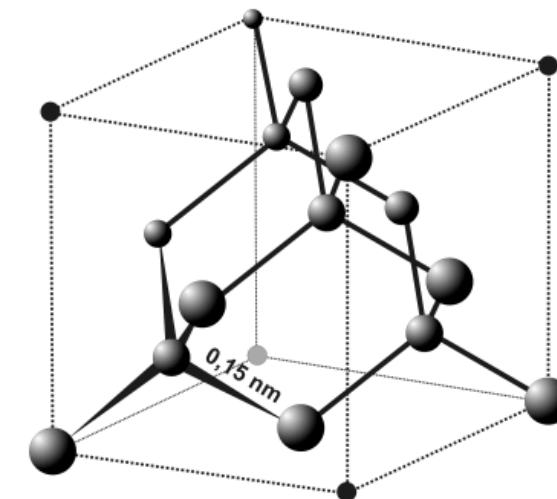
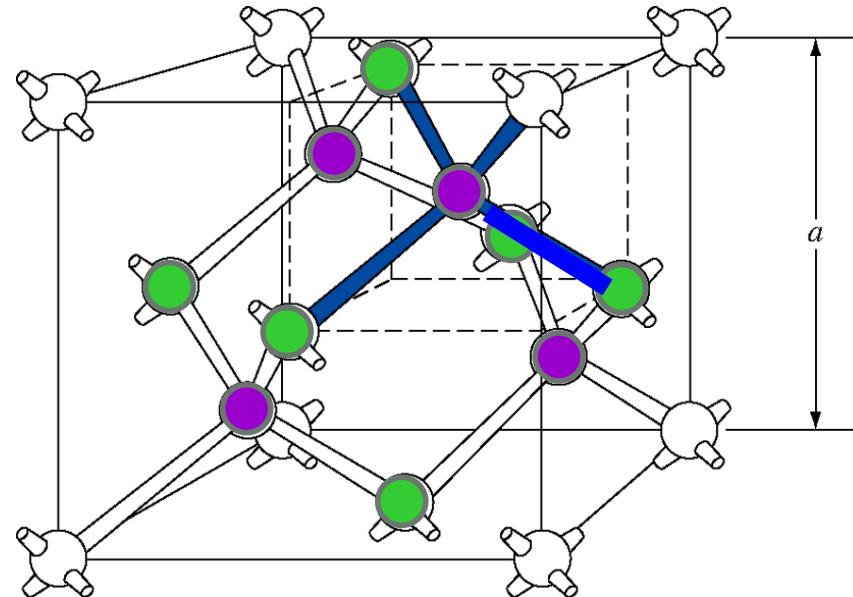


$$\text{densité surfacique} = \frac{1 + 4 \times 1/4}{a \times a\sqrt{2}} = \frac{2}{(5 \times 10^{-8} \text{ cm})^2 \times \sqrt{2}} = 5.66 \times 10^{14} \text{ at.cm}^{-2}$$

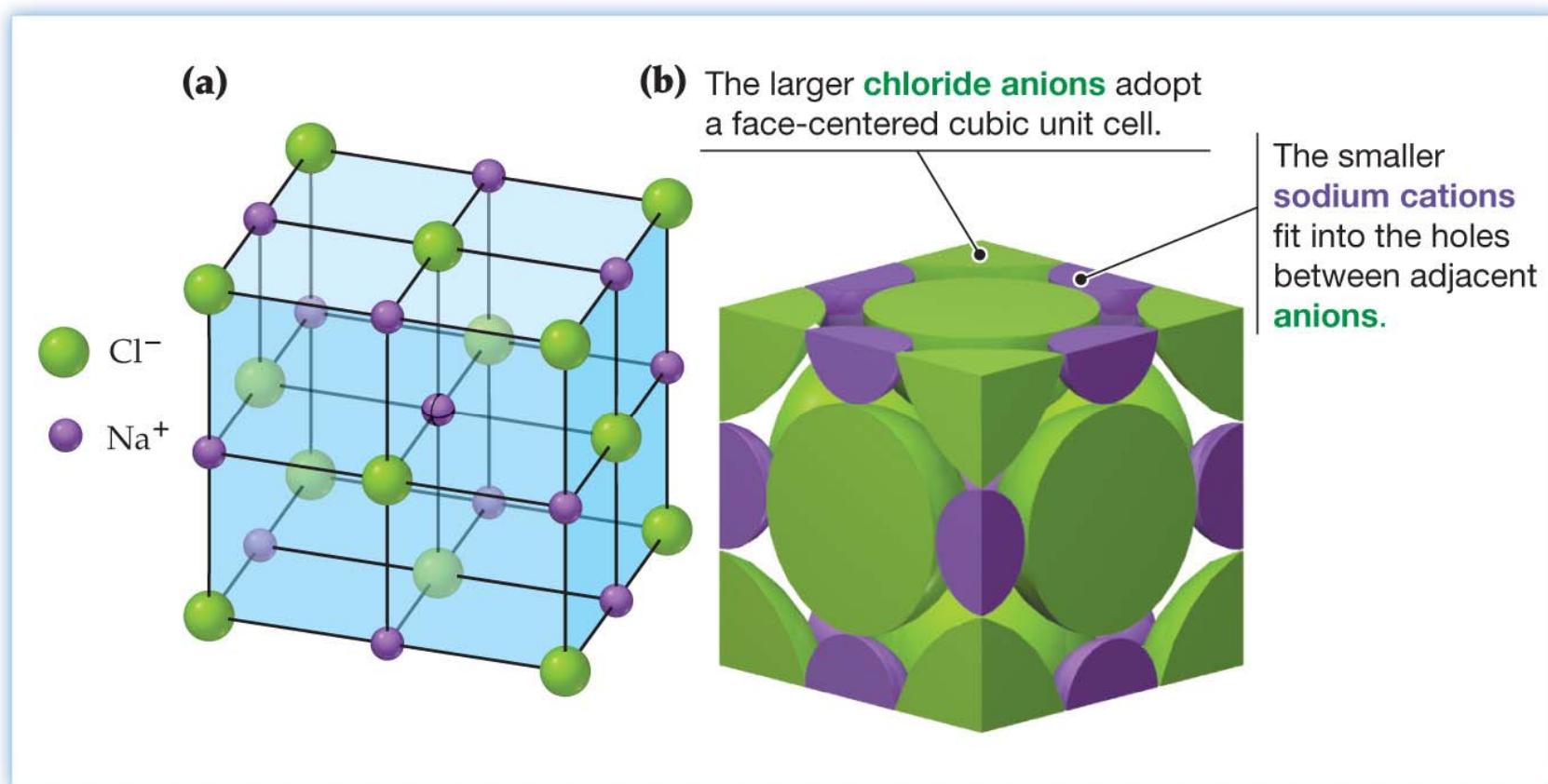


## Le silicium et sa structure « Diamant ».

- Structure cubique CFC
- Deux atomes dans la base
- Identique à 2 CFC décalés de  $\frac{1}{4}$  de diagonale
- Chaque atome a 4 atomes comme plus proches voisins (liaison tétragonale)



# Structure NaCl

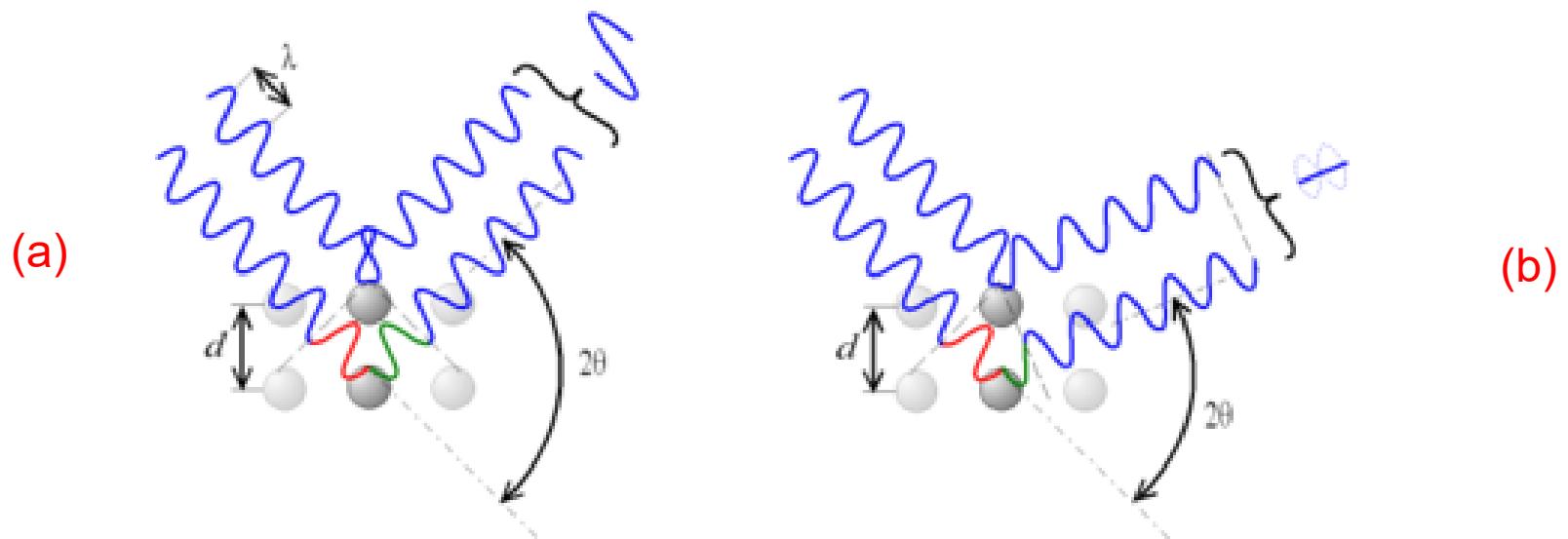


# Rôle physique des plans réticulaires

- Interférences entre les ondes diffusées:
  - Destructives  $\Leftrightarrow$  pas de propagation (b)
  - Constructives  $\Leftrightarrow$  on les « voit » (a)

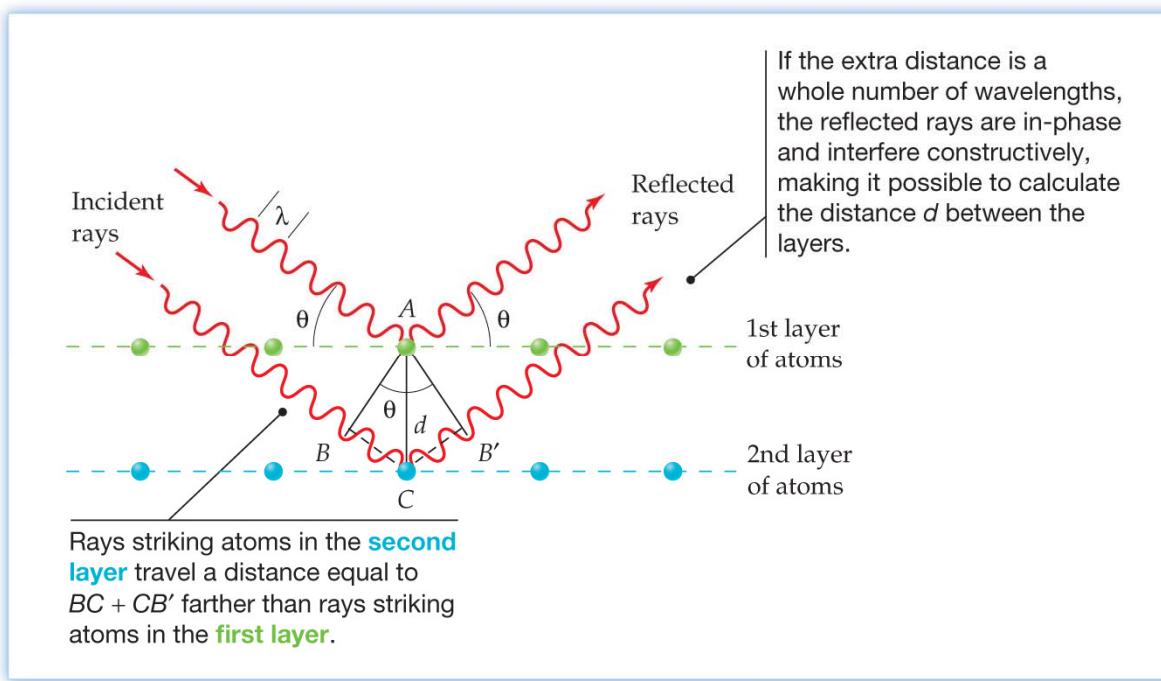


Condition de diffraction de Bragg



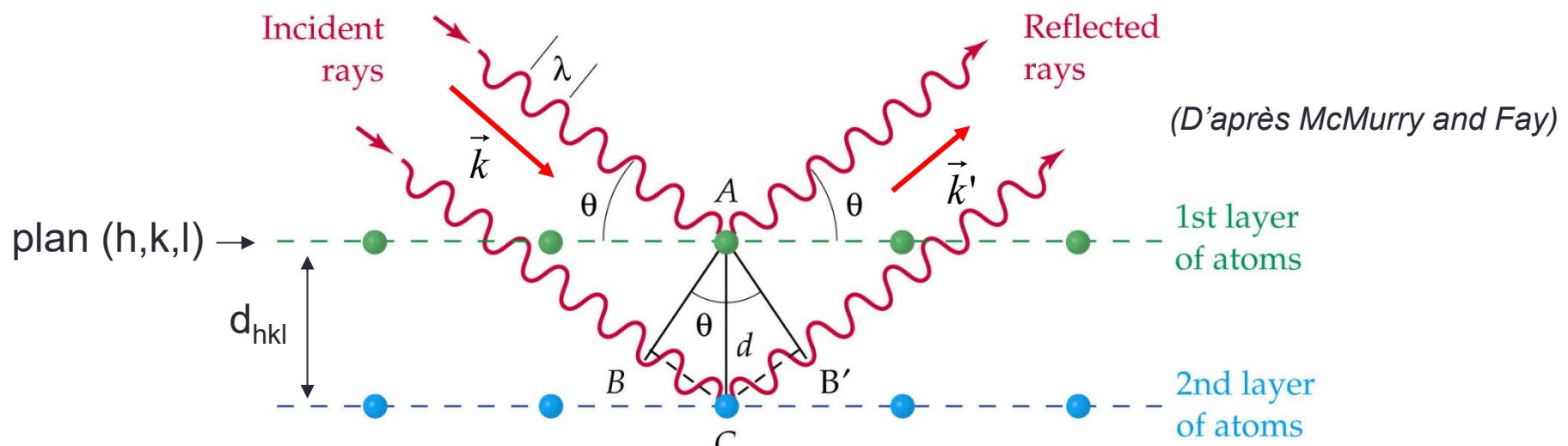
# Rôle physique des plans réticulaires

- **Diffraction:** Occurs when electromagnetic radiation is scattered by an object containing regularly spaced lines (such as a diffraction grating) or points (such as the atoms in a crystal)



# Rôle physique des plans réticulaires

- Détermination de la *loi de Bragg* : méthode élémentaire.
  - On considère les plans cristallins comme des miroirs
  - On calcule la différence de marche (ddm) entre les deux rayons
  - Interférence constructive  $\Leftrightarrow ddm = n\lambda$



$$ddm = 2d_{hkl} \sin \theta$$



$$2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$$



$$d_{hkl} = \frac{n\lambda}{2 \sin \theta}$$

# CHAPITRE 3

---

Mécanique ondulatoire :  
l'équation de *Schrödinger*

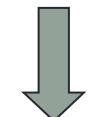
# La fin de la mécanique classique?

- La matière:

- Position
- Vitesse (quantité de mouvement)



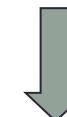
- Loi de Newton



*Six variables permettent de définir parfaitement l'état de chaque corpuscule*

- La lumière:

- Composante champ électrique
- Composante champ magnétique



- Équations de Maxwell



*On ne peut séparer la radiation en corpuscules maintenus localisés dans l'espace – processus d'interférence et diffraction*

# La fin de la mécanique classique?

- Au début du 20° siècle:

- Théorie corpusculaire de la matière:

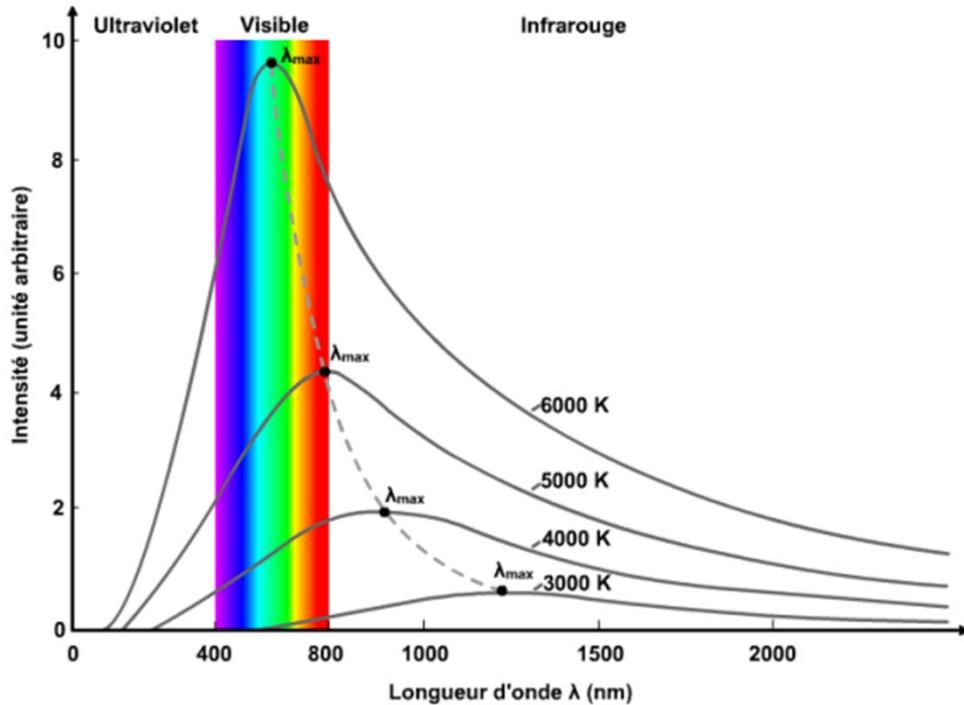
- « marche » même à l'échelle microscopique
    - Complexité du pb à cette échelle  $\Leftrightarrow$  mécanique statistique

- Théorie ondulatoire de la lumière:

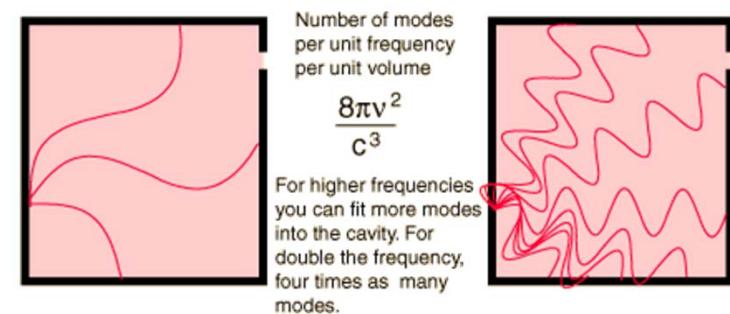
- Acceptée depuis Fresnel
    - Tous les phénomènes connus de la lumière interprétés
    - Équations de Maxwell + ondes radio (Hertz)  $\Leftrightarrow$  synthèse optique et électricité

# La fin de la mécanique classique?

- De nouvelles expériences / découvertes posent des problèmes d'interprétation:
  - Rayonnement du corps noir



Corps noir: objet qui absorbe toute radiation qu'il reçoit

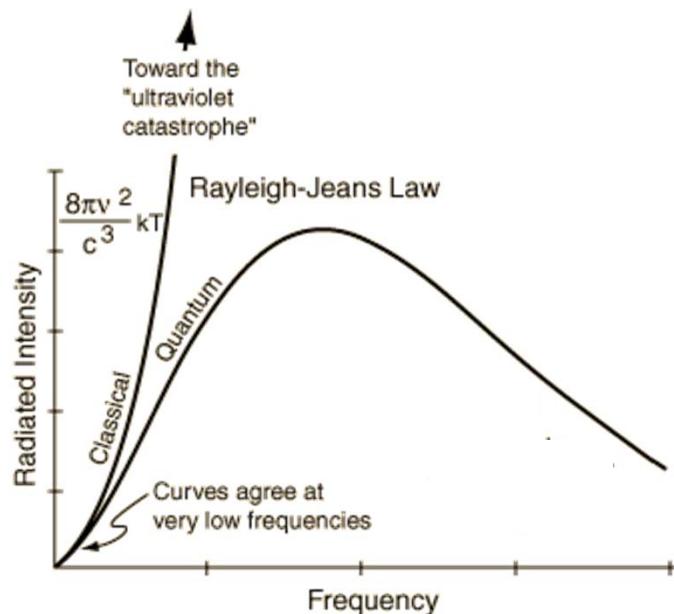


À l'intérieur de la cavité, le champ électromagnétique est équivalent à un ensemble d'oscillateurs harmoniques indépendants. Leur énergie moyenne (**en supposant que l'énergie peut varier de manière continue**) est donnée par :

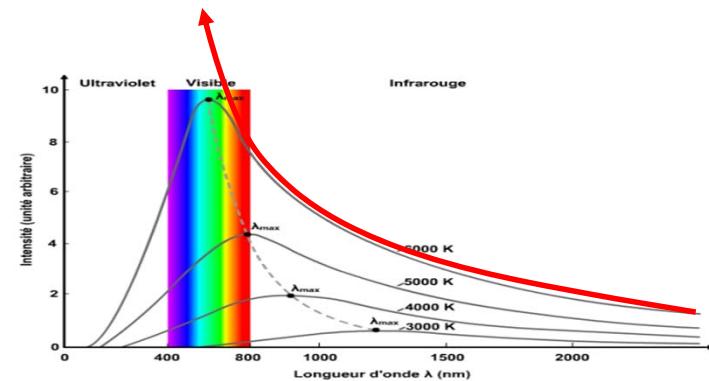
$$\bar{E} = \frac{\int_0^\infty E e^{-E/kT} dE}{\int_0^\infty e^{-E/kT} dE} = kT$$

# La fin de la mécanique classique?

- De nouvelles expériences / découvertes posent des problèmes d'interprétation:
  - Rayonnement du corps noir



Corps noir: objet qui absorbe toute radiation qu'il reçoit



À l'intérieur de la cavité, le champ électromagnétique est équivalent à un ensemble d'oscillateurs harmoniques indépendants. Leur énergie moyenne (**en supposant que l'énergie peut varier de manière continue**) est donnée par :

$$\bar{E} = \frac{\int_0^\infty E e^{-E/kT} dE}{\int_0^\infty e^{-E/kT} dE} = kT$$

# La fin de la mécanique classique?

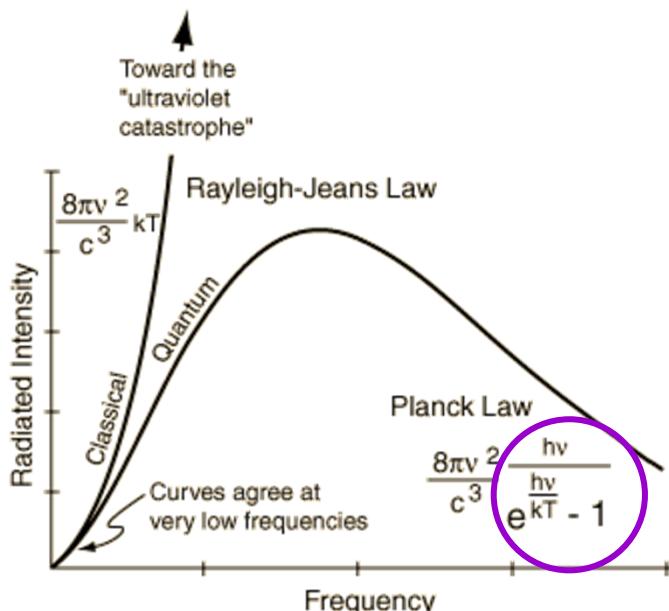
- De nouvelles expériences / découvertes posent des problèmes d'interprétation:
  - Rayonnement du corps noir

*M. Planck* : Il postule que les échanges d'énergie entre la matière et les radiations ne se font pas de manière continue mais par des quantités indivisibles et discrète: *quanta* d'énergie. Il montre que la relation entre Energie et Fréquence est donnée par:

$$E_n = n \cdot h\nu$$

*M. Planck* : lie l'énergie et la fréquence  $\Leftrightarrow$  modes autorisés de plus en plus difficile à peupler. Dans l'enceinte ( le corps noir), les atomes de la paroi jouent le rôle d'oscillateurs de fréquence  $\nu$  dont l'énergie de l'atome est donnée par

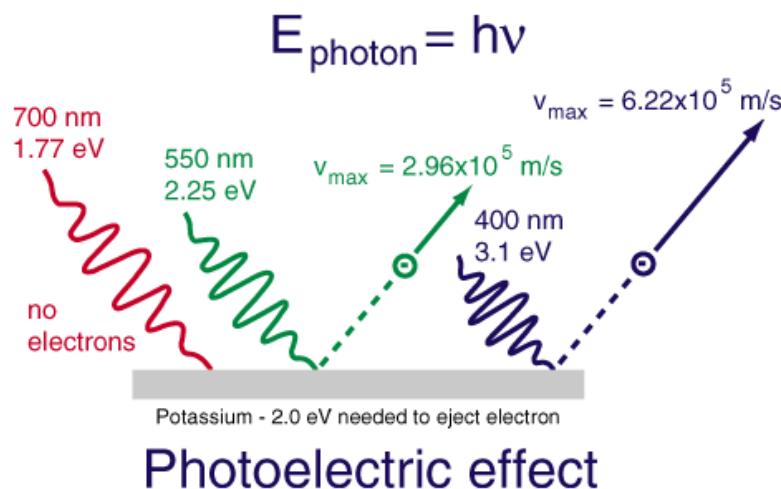
$E_n = n \cdot h\nu$ . **Il en résulte que l'énergie moyenne par mode est l'énergie quantifiée fois la probabilité que ce mode soit occupé**



$$\bar{E} = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} E_n e^{-E/kT}}{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-E/kT}} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

# La fin de la mécanique classique?

- De nouvelles expériences / découvertes posent des problèmes d'interprétation:
  - Effet photo électrique

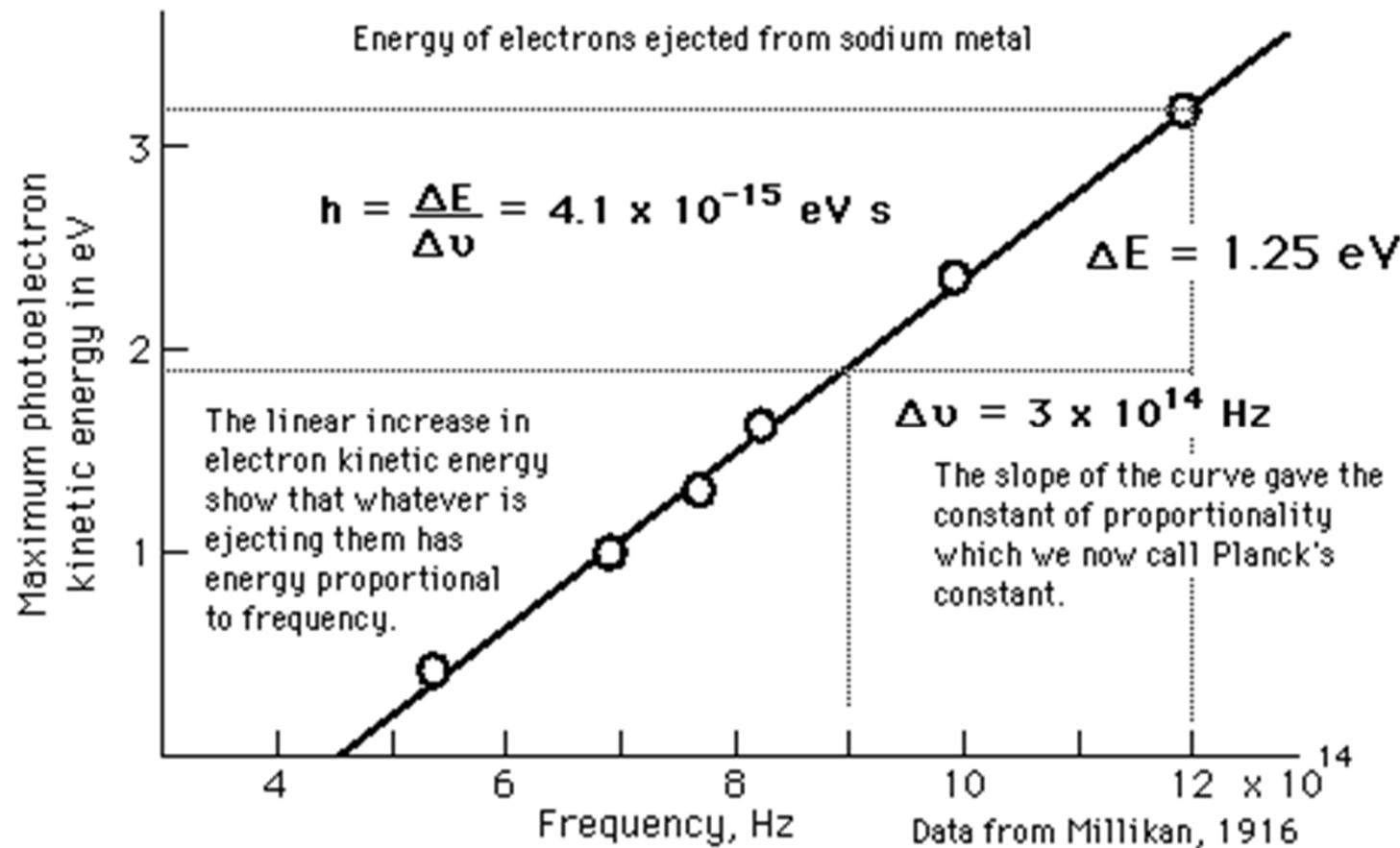


The remarkable aspects of the photoelectric effect when it was first observed were:

1. The electrons were emitted immediately - no time lag!
2. Increasing the intensity of the light increased the number of photoelectrons, but not their maximum kinetic energy!
3. Red light will not cause the ejection of electrons, no matter what the intensity!
4. A weak violet light will eject only a few electrons, but their maximum kinetic energies are greater than those for intense light of longer wavelengths!

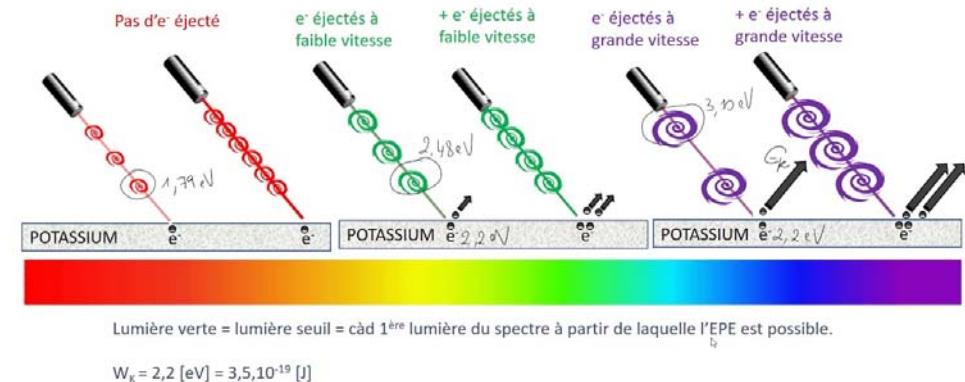
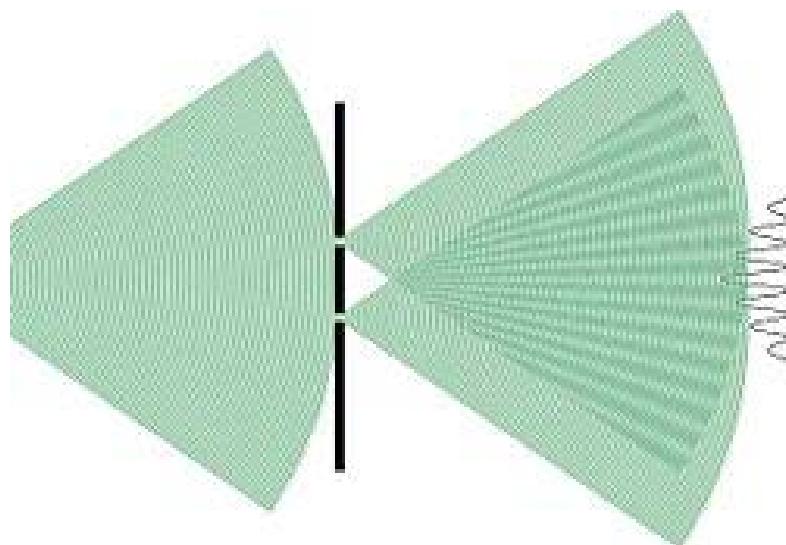
A. Einstein : quantification de l'énergie de la lumière (photon)  $\Leftrightarrow E = nh\nu$  , la lumière comme grain de lumière  $\Leftrightarrow$  aspect corpusculaire !!

# La fin de la mécanique classique?

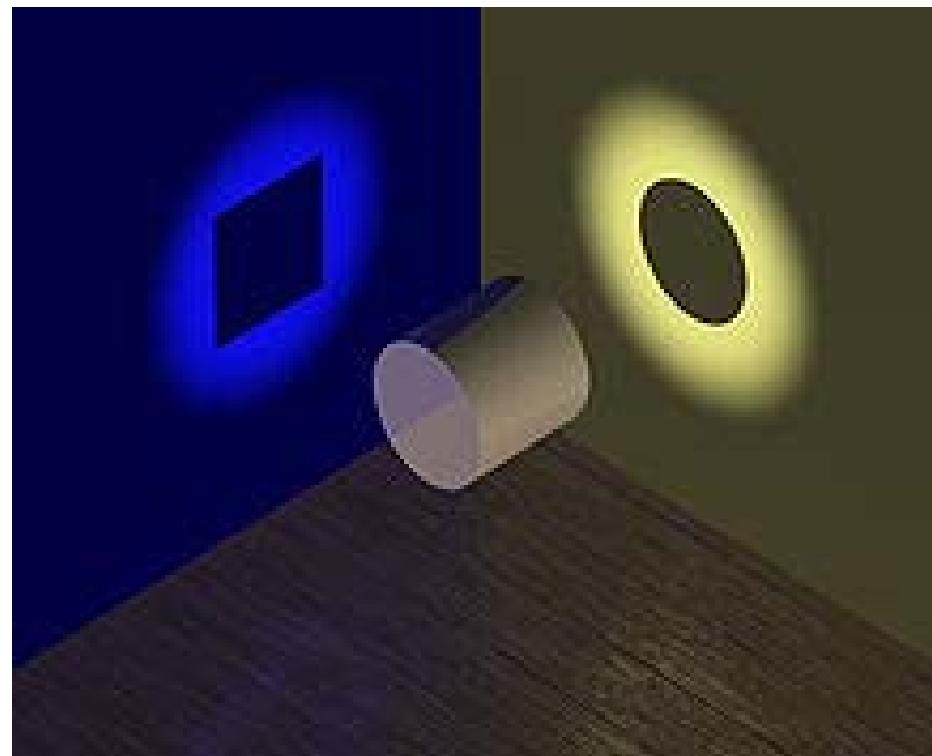


# La fin de la mécanique classique?

- De nouvelles expériences / découvertes posent des problèmes d'interprétation:
  - Dualité onde – particule: la nature corpusculaire (effet photoélectrique) de la lumière est acquise , mais la nature ondulatoire est également admise (fentes de Young) !
  - La lumière est composée d'un quantum, une particule quantique qui ne peut être décrite que par les lois d'une mécanique nouvelle: *la mécanique ondulatoire est née.*
  - Suivant l'expérience considérée, la nature ondulatoire de la lumière doit être retenue (propagation de la lumière), dans d'autres c'est l'aspect corpusculaire (interaction lumière – matière).



# Dualité: métaphore du cylindre



# La fin de la mécanique classique?

- De nouvelles expériences / découvertes posent des problèmes d'interprétation:
  - Louis de Broglie: introduction des *ondes de matières*. (1924)
  - Hypothèse: la dualité onde – corpuscule est une propriété générale d'objets *microscopiques* et la matière, comme la lumière, présente à la fois un aspect ondulatoire et un aspect corpusculaire.
  - Hypothèse confirmée par la *diffraction des électrons* quelques années plus tard (1927).

RECHERCHES SUR LA THÉORIE  
DES QUANTA

Par M. Louis de BROGLIE

Annales de Physique — 10<sup>e</sup> Série — Tome III — Janvier-Février 1925

*ondes de matières*  $\Leftrightarrow$  longueur d'onde de de Broglie :

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{p}$$

# Dualité onde corpuscule

## DUALITÉ ONDE-PARTICULE

Toutes les animations et explications sur  
[www.toutestquantique.fr](http://www.toutestquantique.fr)

# La mécanique ondulatoire

- L'équation de Erwin Schrödinger:

*Second Series*

*December, 1926*

*Vol. 28, No. 6*

THE  
PHYSICAL REVIEW

---

AN UNDULATORY THEORY OF THE MECHANICS  
OF ATOMS AND MOLECULES

BY E. SCHRÖDINGER

1. The theory which is reported in the following pages is based on the very interesting and fundamental researches of L. de Broglie<sup>1</sup> on what he called “phase-waves” (“ondes de phase”) and thought to be associated with the motion of material points, especially with the motion of an electron or proton. The point of view taken here, which was first

# La mécanique ondulatoire

- L'équation de Schrödinger:

*I'équation de Schrödinger joue le rôle des lois de Newton et de la conservation de l'énergie de la mécanique classique. C'est une équation d'onde en termes de fonction d'onde qui va prédire analytiquement la probabilité qu'un évènement se produise.*

$$\text{Kinetic Energy} + \text{Potential Energy} = E$$

Classical  
Conservation of  
Energy  
Newton's Laws

$$\frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 = E$$

$$F = ma = -kx$$

Harmonic oscillator  
example.

Quantum  
Conservation of  
Energy  
Schrodinger  
Equation

In making the  
transition to  
a wave equation,  
physical variables  
take the form of  
"operators".

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \rightarrow H \rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2$$

The energy becomes the Hamiltonian operator

$\mathcal{H}\Psi = E\Psi$

Wavefunction

Energy "eigenvalue" for the system.

The form of the Hamiltonian operator for a quantum harmonic oscillator.

$$p = \frac{h}{\lambda} \text{ et } E = E_0 e^{-i(kx - \omega t)}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{2\pi}{k} \Rightarrow p = \hbar k$$

$$\frac{dE}{dx} = -ikE \Leftrightarrow k \Rightarrow -\frac{1}{i} \frac{d}{dx}$$

$$p \Rightarrow -\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} = i\hbar \frac{d}{dx}$$

$$p^2 = pxp = i\hbar \frac{d}{dx} \left( i\hbar \frac{d}{dx} \right) = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 = H$$

$$\Rightarrow H\Psi(x,t) = E\Psi(x,t)$$

$$H\Psi = E\Psi$$

# La mécanique ondulatoire

- L'équation de Schrödinger:

*Le mouvement d'une particule est décrit par une fonction d'onde  $\Psi(r,t)$  dont le carré représente la probabilité de présence (Born) en un point  $r$ . Les fonctions  $\Psi(r,t)$  obéissent à l'équation de Schrödinger:*

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(r,t) + V(r,t) \Psi(r,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(r,t)}{\partial t}$$

$$H\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad \leftarrow \text{Postulat de l'évolution temporelle}$$

- $\Psi(r,t)$  est la fonction d'onde (peut être une quantité complexe)
- $V(r)$  est l'**énergie** potentielle (le potentiel par abus de langage) auquel est soumis la particule
- $m$  est la masse de la particule
- L'équation de Schrödinger:
  - tient compte à la fois de la notion de quanta (Planck) et de la dualité onde – matière (de Broglie)

# La mécanique ondulatoire

- Un cas particulier qui nous intéresse dans ce cours concerne *les régimes stationnaires* où le potentiel  $V=V(r)$  auquel est soumis la particule est *indépendant du temps*.
- La méthode de résolution de cette équation consiste à chercher des solutions *en séparant les variables temps et espace*. On suppose que la fonction d'onde  $\Psi(r,t)$  peut s'écrire:

$$\Psi(r,t) = \varphi(r)\chi(t)$$

- $\varphi(r)$  est une fonction de la position uniquement
- $\chi(t)$  est une fonction du temps uniquement
- En injectant cette forme de solution dans l'équation de Schrödinger, on obtient (*on passe à une dimension*):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\varphi(x)} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + V(x) = i\hbar \frac{1}{\chi(t)} \frac{\partial \chi(t)}{\partial t}$$

# L'équation de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\frac{1}{\varphi(x)} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2}}_{g(x)} + V(x) = i\hbar \underbrace{\frac{1}{\chi(t)} \frac{\partial \chi(t)}{\partial t}}_{f(t)}$$

- La relation ci dessus où une équation du temps est égale à une équation de l'espace, entraîne que ces deux équations sont des constantes. On voit d'autre part que l'équation aux dimensions de la fonction dépendante du temps est  $[f(t)] = [\text{Énergie}]$ . Il vient alors:

$$i\hbar \frac{1}{\chi(t)} \frac{\partial \chi(t)}{\partial t} = E \quad \longrightarrow \quad \chi(t) = A e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$$

- Avec  $E$ , l'énergie de la particule, qui s'écrit :  $E = \hbar\omega$

# L'équation de Schrödinger:

- L'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x)$$

- avec :  $\psi(x, t) = \varphi(x) \exp\left(\frac{-iE}{\hbar}t\right)$

- Conditions aux limites:  $\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1$

- Continuité de la fonction d'onde
- Continuité de la dérivée première

# L'équation de Schrödinger:



- A ce stade, il est important de distinguer la notion *d'état ondulatoire* (onde plane) et *combinaison d'états ondulatoires* (paquet d'ondes).

# Onde plane / paquet d'ondes

- Onde plane:

$$A e^{ikx} e^{-i\omega t}$$

- Paquet d'ondes:

$$\varphi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k/2}^{k_0 + \Delta k/2} A e^{ikx} e^{-i\omega t} dk$$

- Nous allons montrer que *seul un paquet d'onde* peut être une représentation correcte d'une particule.

# Onde plane / paquet d'ondes

- Supposons qu'une particule se déplace dans un potentiel constant  $V(x) = V_0 = \text{cte}$ . La force à laquelle elle est soumise est donnée par  $F = -\nabla V_0 = 0$ , c'est à dire que son mouvement est uniforme et donc son énergie E constante. On va maintenant :
  - Chercher des solutions simples de l'E.S
  - Regarder si ces solutions simples correspondent aux domaines physiques
  - Si tel n'est pas le cas, on essaiera une combinaison linéaire des solutions simples car l'E.S est linéaire en  $\varphi$ .

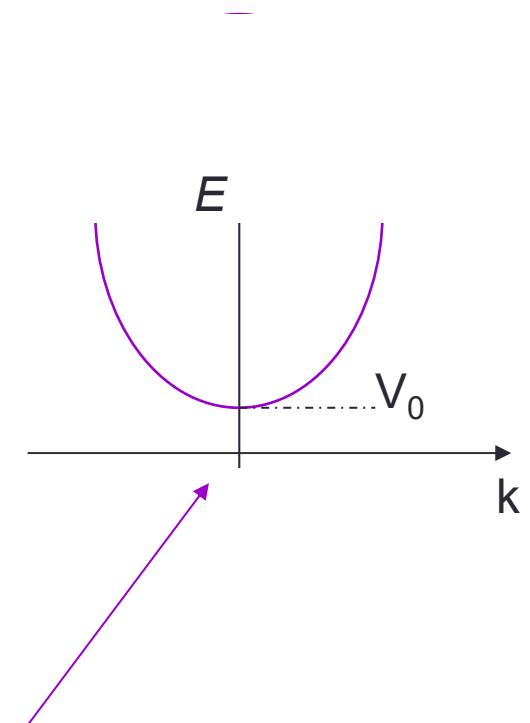
# Onde plane / paquet d'ondes

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + V_0 \varphi(x) = E \varphi(x)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \varphi(x) = 0, \quad E - V_0 > 0$$

Une solution simple de  $\varphi(x)$  peut être :  $\varphi(x) = A e^{ikx}$

avec  $k = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$  soit encore  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0$



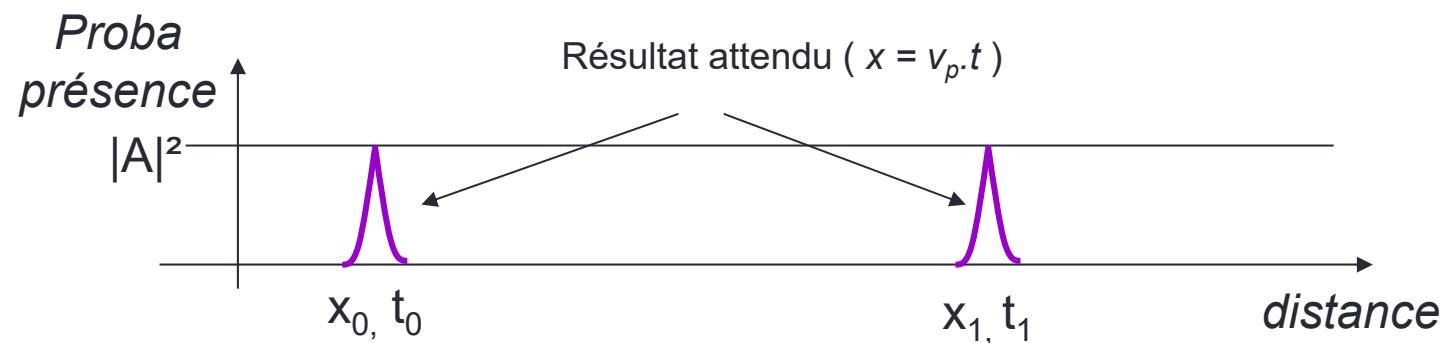
La question est “Peut-on se représenter une particule par cette fonction ?”. Il suffit de *calculer la probabilité de présence dans l'espace (ou ici à 1 Dim)* de cette particule pour répondre à cette question.

# Onde plane / paquet d'ondes

- Onde plane:

$$\psi(x, t) = A e^{ikx} e^{-i\omega t}$$

$$|\psi(x, t)|^2 = (\psi(x, t)\psi^*(x, t))^2 = |A|^2 = \text{cste}$$



- cette probabilité de présence  $|A|^2$  est indépendante de  $x$  et du temps, ce qui est loin d'être « raisonnable » d'un point de vue physique

# Onde plane / paquet d'ondes

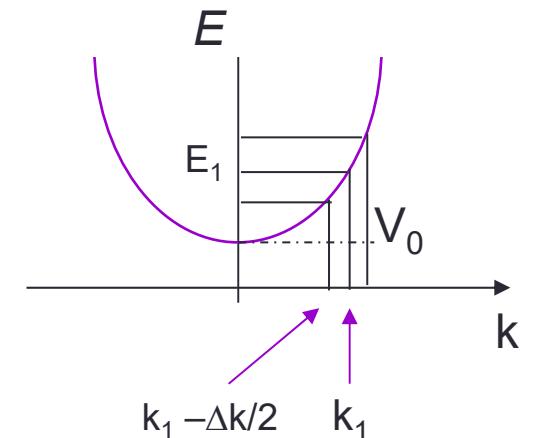
- On va donc essayer une C.L d'ondes planes centrées sur  $k_1$  c'est à dire un paquet d'ondes depuis  $k_1 - \Delta k/2$  et  $k_1 + \Delta k/2$ . La fonction d'onde s'écrit alors:

$$\Psi(x, t) = \int_{k_1 - \Delta k/2}^{k_1 + \Delta k/2} A e^{ikx} e^{-i\omega t} dk$$

- Prenons  $A = \text{cste}$  (hyp simplificatrice)
  - à  $t=0$ :

$$\Psi(x, 0) = \int_{k_1 - \Delta k/2}^{k_1 + \Delta k/2} A e^{ik_1 x} e^{i(k-k_1)x} dk = A e^{ik_1 x} \int_{-\Delta k/2}^{\Delta k/2} e^{i(k-k_1)x} d(k - k_1)$$

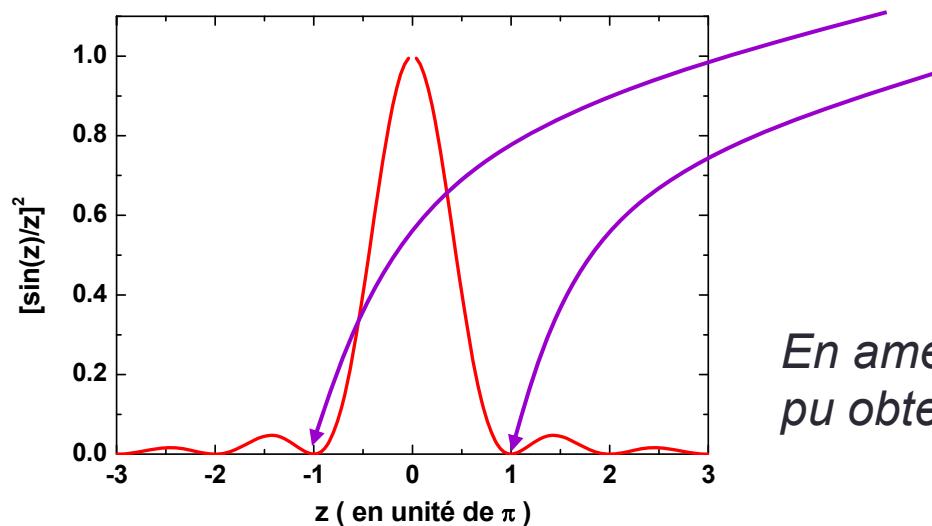
$$\Psi(x, 0) = A e^{ik_1 x} \cdot \frac{1}{ix} \left[ e^{i(k-k_1)x} \right]_{-\Delta k/2}^{\Delta k/2} = A e^{ik_1 x} \Delta k \frac{\sin(\frac{\Delta k x}{2})}{\frac{\Delta k}{2} x}$$



# Onde plane / paquet d'ondes

- On calcule à nouveau la probabilité de présence en un point  $x$ :

$$|\Psi(x,0)|^2 = A^2 \Delta k^2 \frac{\sin^2 z}{z^2} \text{ avec } z = \frac{\Delta k \times x}{2}$$



$$x_1 = \pm \frac{2\pi}{\Delta k} \Rightarrow \Delta x = 2x_1 \approx \frac{4\pi}{\Delta k}$$

$$\Leftrightarrow \Delta x \times \Delta k \approx 4\pi$$

*En améliorant la loi d'Amplitude on aurait pu obtenir la relation d'Heisenberg:*

$$\Delta x \times \Delta k \approx 2\pi$$

# Onde plane / paquet d'ondes

- On se place maintenant à  $t=t_1$ :

$$\Psi(x, t_1) = \int_{k_1 - \Delta k/2}^{k_1 + \Delta k/2} A e^{-i\omega_k t_1} e^{ikx} dk = A e^{ik_1 x} e^{-i\omega_1 t_1} \int_{-\Delta k/2}^{\Delta k/2} e^{i(k-k_1)x} e^{i(\omega_k - \omega_1)t_1} d(k - k_1)$$

$$DL: \omega_k = \omega_1 + \left( \frac{d\omega_k}{dk} \right)_{k_1} (k - k_1) + \dots$$

$$\Psi(x, t_1) = A e^{ik_1 x} e^{-i\omega_1 t_1} \int_{-\Delta k/2}^{\Delta k/2} e^{i(k-k_1)x} e^{i(k-k_1) \left( \frac{d\omega_k}{dk} \right)_{k_1} t_1} d(k - k_1)$$

posons  $x' = x - \left( \frac{d\omega_k}{dk} \right)_{k_1} t_1 \Rightarrow \Psi(x, t_1) = A e^{ik_1 x} e^{-i\omega_1 t_1} \int_{-\Delta k/2}^{\Delta k/2} e^{i(k-k_1)x'} d(k - k_1)$

$$\Psi(x, t_1) = A e^{ik_1 x} e^{-i\omega_1 t_1} \times \frac{e^{\frac{\Delta k}{2}x'} - e^{-\frac{\Delta k}{2}x'}}{ix'} = B \Delta k \frac{\sin \frac{\Delta k}{2}x'}{\frac{\Delta k}{2}x'} \text{ avec } \frac{\Delta k}{2}x' = \frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta \omega}{2}t_1$$

# Onde plane / paquet d'ondes

- On obtient alors le même résultat qu'à  $t=0$  mais pour  $x'=0$ , ie

$$x = \left( \frac{d\omega}{dk} \right)_{k_1} t_1$$



→ La vitesse de la particule =  $v_g$  = *vitesse de groupe* qui est calculée au centre du paquet d'onde:

$$v_g = \left( \frac{d\omega}{dk} \right)_{k_1}$$

# Vitesse de phase/ vitesse de groupe

- Dans le cas **d'une onde plane**, la vitesse considérée est la vitesse de propagation de plans en phase ou vitesse de phase:

$$v_\varphi = \frac{\omega}{k} \quad (k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{v_\varphi T} = \frac{\omega}{v_\varphi})$$

d'après de Broglie ( $p = \frac{h}{\lambda} = \frac{hk}{2\pi} = \hbar k$ )

$$v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \frac{E/\hbar}{p/\hbar} = \frac{E}{p} = \frac{E}{\hbar k} \quad \text{or} \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0$$

$$\Rightarrow v_\varphi = \frac{1}{2} \frac{\hbar k}{m} + \frac{V_0}{\hbar k} = \frac{1}{2} \frac{p}{m} + \frac{V_0}{p}$$

- Raisonnons sur **le paquet d'ondes**:

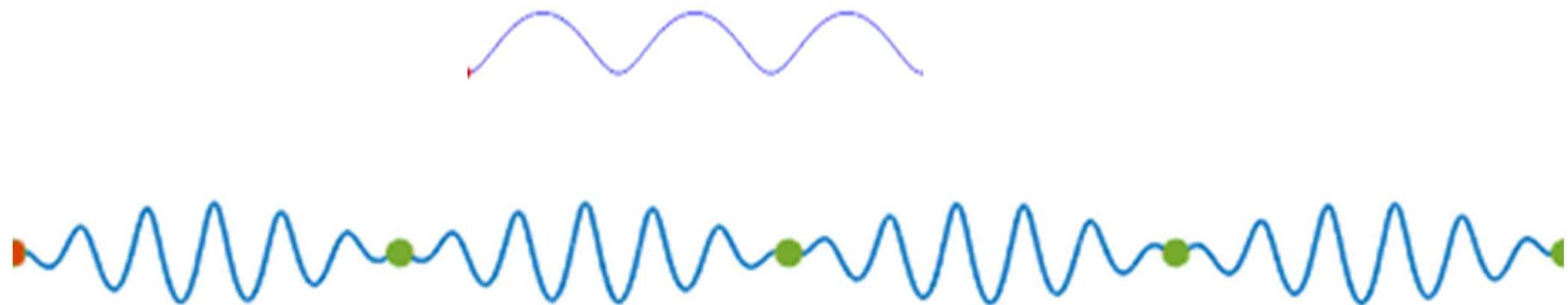
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0$$

$$\left( \frac{dE}{dk} \right)_{k_1} = \hbar \left( \frac{d\omega}{dk} \right)_{k_1} = \frac{\hbar^2 k_1}{m} \Rightarrow v_g = \frac{p_1}{m}$$

$$\Rightarrow \text{on obtient bien } v_g = \frac{p}{m}$$

Intervient alors que  $V_0 = \text{cste!}$   
 $\Leftrightarrow$  aucune intervention sur le mvt de la particule; absurde car  $v_\varphi = p/m$

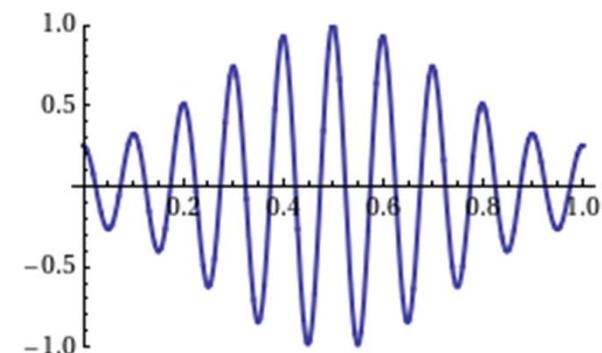
# Vitesse de phase/ Vitesse de groupe



Vitesses de phase et de groupe d'une superposition de deux ondes monochromatiques. **Le point rouge** avance à la **vitesse de phase**, et les **points verts** à la **vitesse de groupe**. Dans cet exemple, la vitesse de phase vaut le double de la vitesse de groupe.

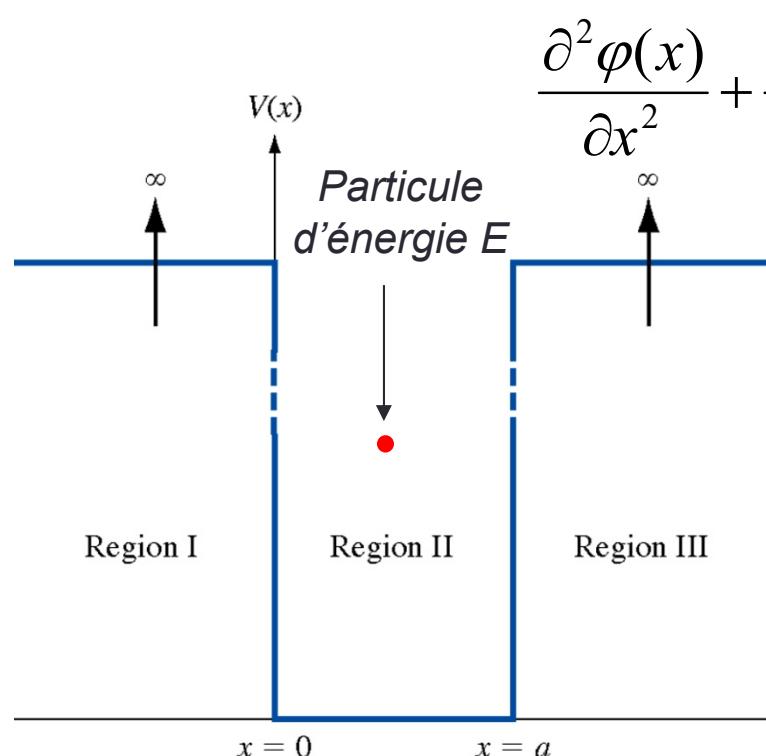
Un exemple dans lequel la vitesse de groupe et la vitesse de phase sont de signes opposés : l'enveloppe du paquet (donc la vitesse de groupe) se dirige vers la droite, alors que la phase (donc la vitesse de phase) se dirige vers la gauche.

<https://fr.wikipedia.org/>



# Mécanique ondulatoire: exemples d'applications

- *Le puits de largeur a et de potentiel infini:*
  - « représente » l'exemple classique d'une particule liée.



$$\frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \varphi(x) = 0 \quad \text{on pose } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

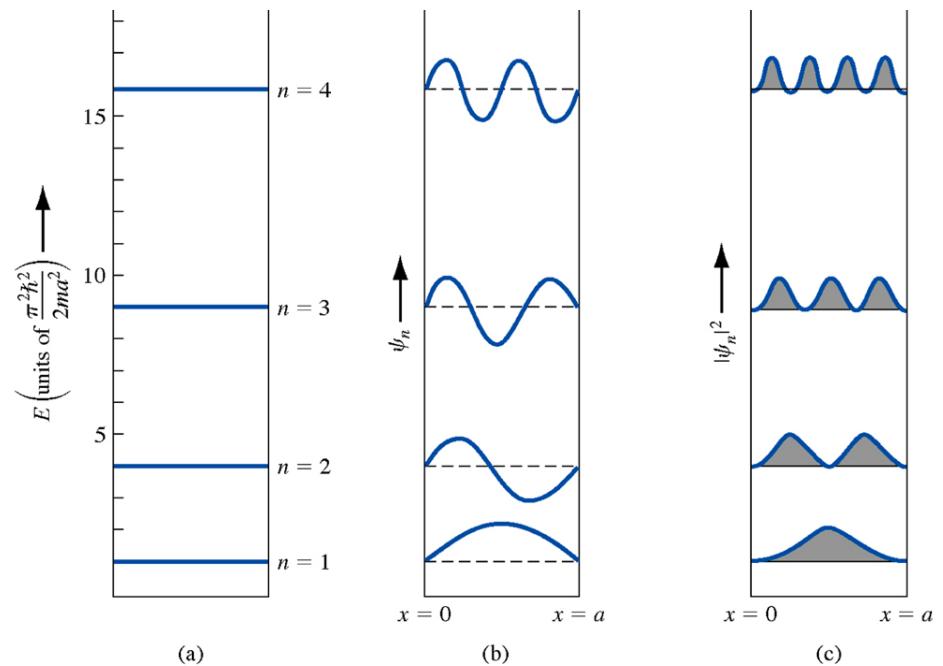
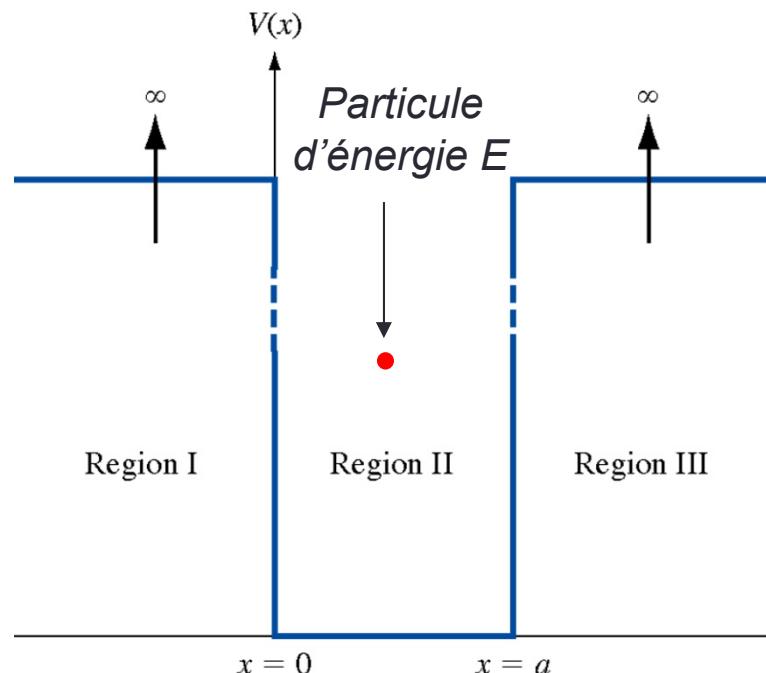
- Région II:  $\varphi_{II}(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx)$
- Région I et III:  $\varphi(x) = 0$
- Continuité en  $x=0$  et  $x=a$ 
  - $A=0$
  - $B\sin(ka)=0 \Leftrightarrow k=n\pi/a$
- proba entre 0 et a:

$$\bullet B = \pm \sqrt{\frac{2}{a}} \text{ ou } \pm i \sqrt{\frac{2}{a}}$$

# Mécanique ondulatoire: exemples d'applications

- *Le puits de largeur  $a$  et de potentiel infini:*

$$\varphi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \text{ avec } n = 1, 2, 3, \dots \quad E = E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} \text{ avec } n = 1, 2, 3, \dots$$



# Mécanique ondulatoire: exemples d'applications

- *La marche de potentiel:*
  - *Région I:*

$$\frac{\partial^2 \varphi_1(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi_1(x) = 0$$

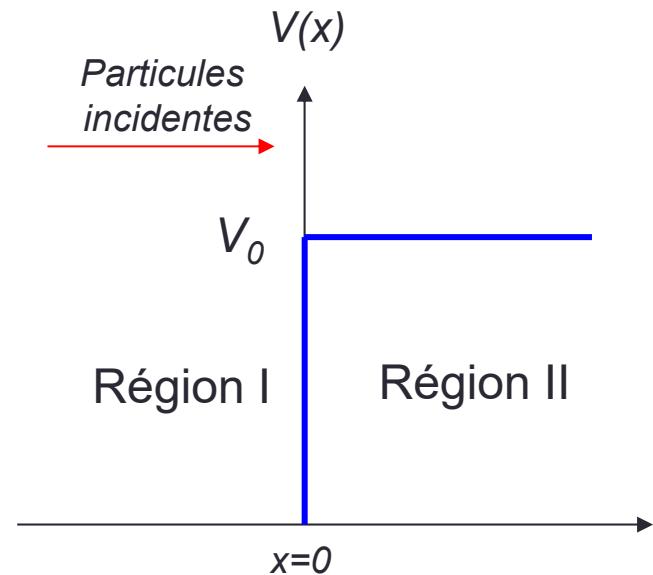
$$\Rightarrow \varphi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad \text{avec } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

\_\_\_\_\_

- *Région II ( $0 < E < V_0$ )*

$$\frac{\partial^2 \varphi_2(x)}{\partial x^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \varphi_2(x) = 0$$

$$\Rightarrow \varphi_2(x) = A_2 e^{\rho x} + B_2 e^{-\rho x} \quad \text{avec } \rho = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$



# Mécanique ondulatoire: exemples d'applications

- *La marche de potentiel:*
  - $A_2 = 0$  (divergence)
  - *Calcul du coefficient de réflexion:*

Flux de particules réfléchies ( $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ )

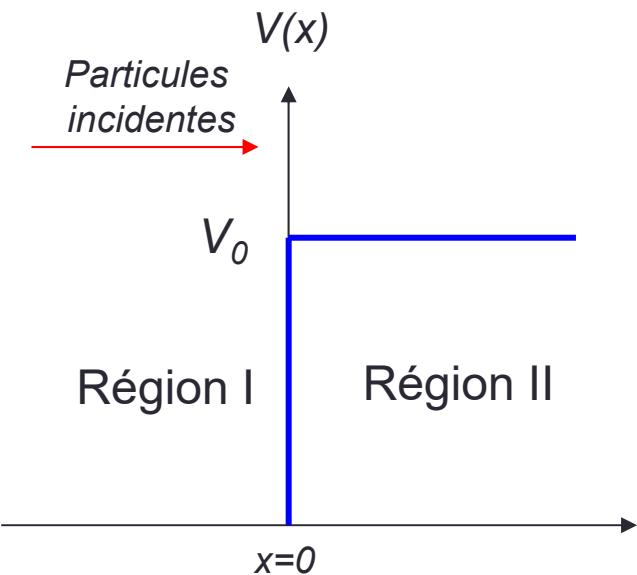
$$R = \frac{v_r}{v_i} \frac{B_1 B_1^*}{A_1 A_1^*} = \frac{v_r}{v_i} \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2$$

- *dans la région I,  $V=0 \Leftrightarrow l'énergie est l'énergie cinétique$*

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left( \frac{1}{2} m v^2 \right)} = \frac{mv}{\hbar} \rightarrow v_i = v_r = \frac{\hbar}{m} k$$



$\varphi_2(x) \neq 0 \Leftrightarrow la\ particule\ (à\ la\ différence\ de\ la\ méca\ classique)\ peut\ s'y\ trouver$



$$R = 1$$

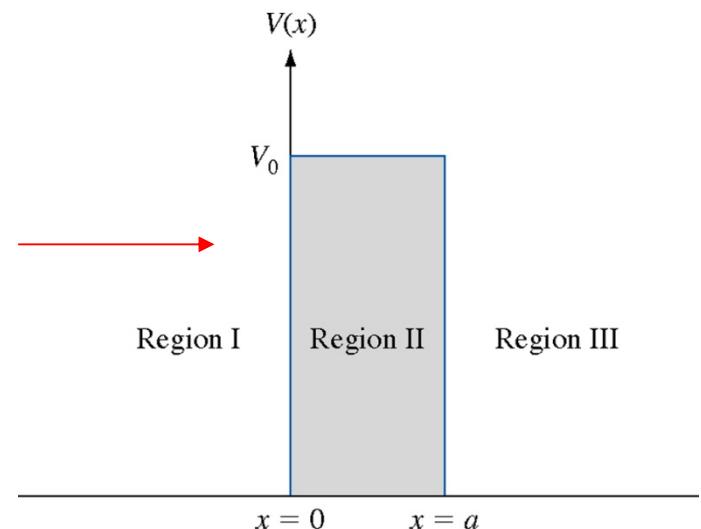
# Mécanique ondulatoire: exemples d'applications

- La barrière de potentiel ( $E < V_0$ ):

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad \text{avec } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\varphi_2(x) = A_2 e^{\rho x} + B_2 e^{-\rho x} \quad \text{avec } \rho = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$$

$$\varphi_3(x) = A_3 e^{ikx} + \cancel{X}_3 e^{-ikx}$$



- Facteur de transmission:

$$T = \frac{v_t}{v_i} \frac{A_3 A_3^*}{A_1 A_1^*} = \frac{A_3 A_3^*}{A_1 A_1^*} = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 \left[ \sqrt{2m(V_0 - E)a / \hbar} \right]} \neq 0$$

C'est l'effet tunnel (T~78% avec 1 électron,  $E=V_0/2=1\text{eV}$  et  $a=1\text{\AA}$ )

# CHAPITRE 4

---

Les électrons libres :  
le modèle de *Sommerfeld*

# Électron libre

- Électron libre  $\Leftrightarrow$  potentiel (énergie) est nul partout  $\Leftrightarrow V(x)=0$ :

$$\frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi(x) = 0$$

- Solution de cette équation différentielle peut se mettre sous la forme:

$$\varphi(x) = A \exp\left[\frac{i\sqrt{2mE}}{\hbar} x\right] + B \exp\left[-\frac{i\sqrt{2mE}}{\hbar} x\right]$$

- Soit:

$$\psi(x, t) = \varphi(x) \exp(-i \frac{E}{\hbar} t) = A \exp\left[\frac{i}{\hbar} (x\sqrt{2mE} - Et)\right] + B \exp\left[-\frac{i}{\hbar} (x\sqrt{2mE} + Et)\right]$$

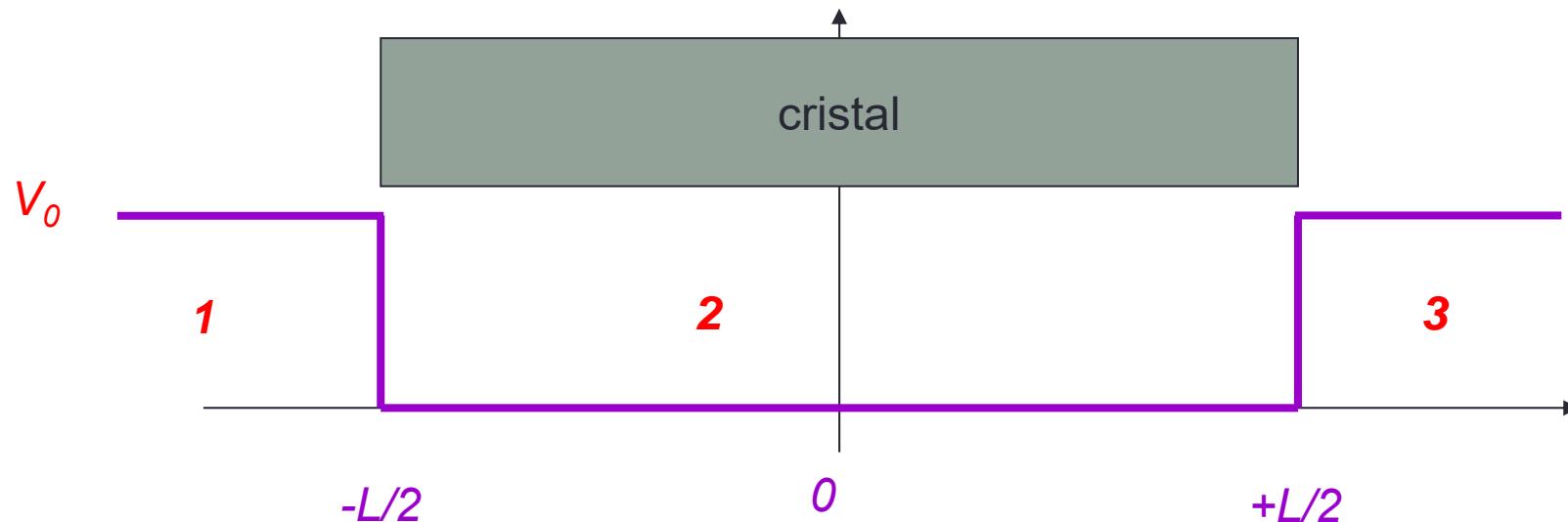
# Électron libre

$$\psi(x,t) = \varphi(x) \exp(-i \frac{E}{\hbar} t) = A \exp\left[\frac{i}{\hbar}(x\sqrt{2mE} - Et)\right] + B \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(x\sqrt{2mE} + Et)\right]$$

- Onde propagative  $\Leftrightarrow$  une particule dans le vide peut être représentée par une onde : c'est normal, on est parti de l'éq. de Schrödinger !
- Supposons (simplicité!) que  $B=0 \Leftrightarrow$  onde se propageant uniquement vers les  $x>0$ :
  - *Vecteur d'onde:*  $k = 2\pi/\lambda$
  - *Longueur d'onde:*
  - *Énergie:*   $E(k)$  c'est une parabole
  - *Probabilité de présence:* cste  $= AA^*$   $\Leftrightarrow$  en accord avec Heisenberg ( $k$  défini  $\Rightarrow x$  indéfini)  $\Leftrightarrow$  réalité physique : Paquet d'ondes

# Potentiel de Sommerfeld

- A. Sommerfeld considère 1 cristal unidirectionnel (1D) de longueur L
- Les électrons sont liés au cristal par les forces d'attraction Coulombienne.
- Les électrons sont piégés  $\Leftrightarrow$  ils ne peuvent sortir



# Potentiel de Sommerfeld

- *Simplification*: on se rapproche de la réalité en considérant que la fonction d'onde associée à l'électron s'annule aux limites ( $\pm L/2$ )  $\Leftrightarrow$  les électrons ne peuvent s'échapper du cristal
- *Démarche*:
  - On cherche des solutions de l'E.S
  - On ne garde que celles qui satisfont les conditions de continuités
  - On forme un paquet d'ondes avec les conditions aux limites pour représenter l'électron.

# Potentiel de Sommerfeld

- Solution en région 2 (idem électron libre):*

$$\frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi(x) = 0 \quad \varphi(x) = A e^{ikx}$$

- Conditions aux limites:*

- Réelles: s'annulent en  $\pm L/2$

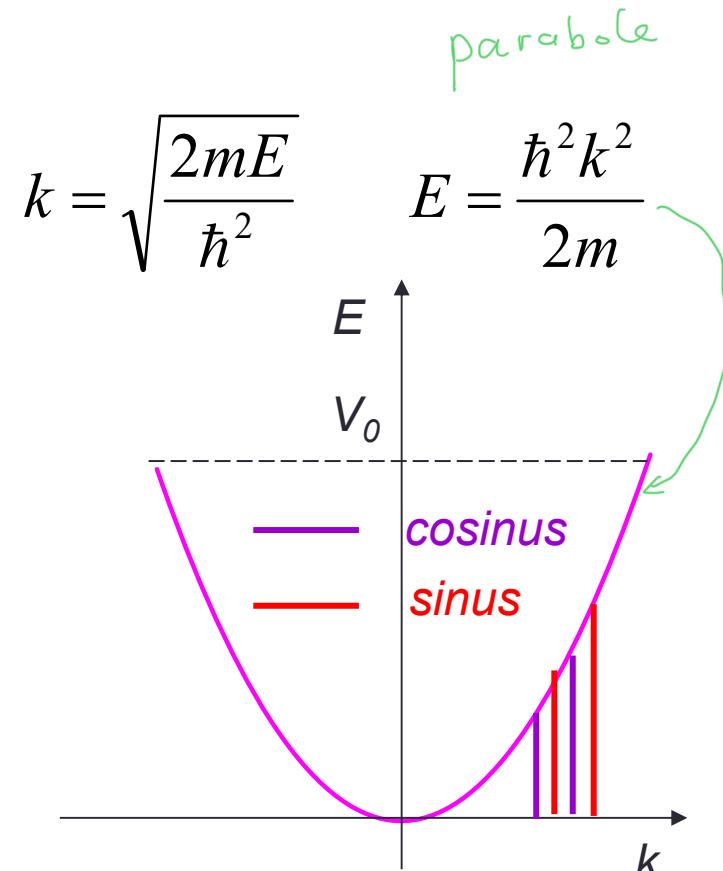
$$\begin{array}{c} \frac{Ae^{ikx} + cc}{2} \\ \Downarrow \\ A \cos(kx) \end{array} \qquad \begin{array}{c} \frac{Ae^{ikx} - cc}{2} \\ \Downarrow \\ A \sin(kx) \end{array}$$

- Solutions en cosinus

$$\cos k \frac{L}{2} = 0 \Rightarrow k = (2p+1) \frac{\pi}{L} \Rightarrow \Delta k = \frac{2\pi}{L}$$

- Solutions en sinus

$$\sin k \frac{L}{2} = 0 \Rightarrow k = p \frac{2\pi}{L} \Rightarrow \Delta k = \frac{2\pi}{L}$$



Le vecteur d'onde est quantifié  
 $\Leftrightarrow$  l'énergie l'est également

# Potentiel de Sommerfeld

- *Conditions cycliques de Born von Karmann:*
  - L'idée est de considérer qu'à l'échelle de la longueur d'onde électronique, la dimension du cristal est infinie  $\Leftrightarrow$  on assimile le cristal unidimensionnel de longueur  $L$  à un cercle de périmètre  $L$  : on « oublie » les conditions aux limites?
  - La situation en  $x$  et en  $x+L$  est identique:

$$\left. \begin{aligned} e^{ikx} &= e^{ik(x+L)} \\ e^{ikL} &= 1 \Rightarrow kL = p \times 2\pi \\ \Rightarrow k &= p \frac{2\pi}{L} \end{aligned} \right\}$$

*Même résultat: il y a encore quantification de  $k$  donc de  $E$*

# Modèle de Sommerfeld

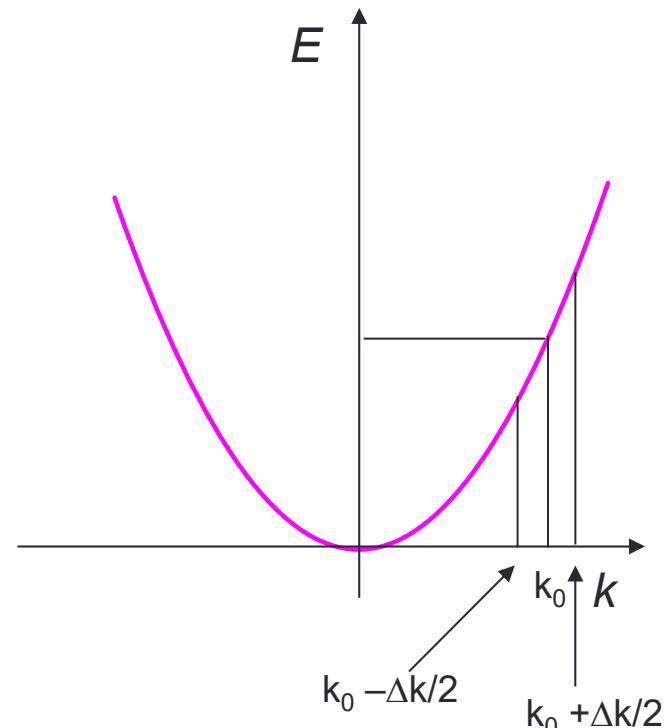
- L'électron de Sommerfeld:
  - Soit l'électron en  $k_0$ : L est de l'ordre de  $10^8 \text{Å}$  ( $1 \text{ cm}$ )  $\Leftrightarrow$  on admet que le paquet d'onde de largeur  $\Delta k$ , constitue un pseudo continuum car:

$$\Delta k = \frac{2\pi}{L} = \frac{2\pi}{10^8} \approx 10^{-7} \text{ A}^{-1}$$

- *Vitesse de l'électron*:

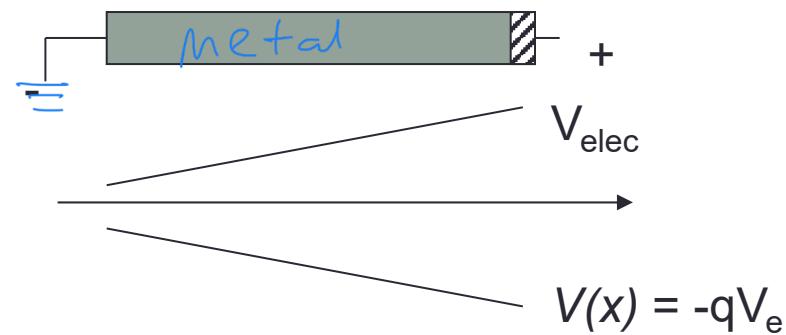
$$v_g = \left( \frac{d\omega}{dk} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \quad \text{avec } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\Rightarrow v_g = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m}$$



# Modèle de Sommerfeld

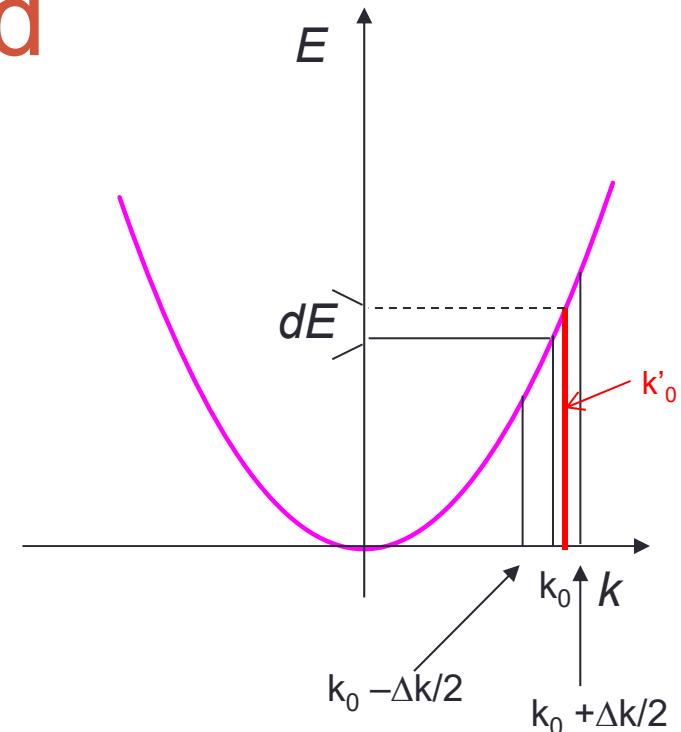
- L'électron de Sommerfeld:
  - *Accélération de l'électron:*



L'état (électron) acquiert de l'énergie

$$\Leftrightarrow \text{Entre } t \text{ et } t+dt \Rightarrow dE = F \cdot v_g \cdot dt$$

$\Leftrightarrow$  Si  $E$  change,  $k$  change  $\Leftrightarrow$  la valeur centrale de  $k_0$  a changé ( $k'_0$  -).



$$dE = F \times v_g \times dt = F \frac{1}{\hbar} \left( \frac{dE}{dk} \right)_{k_0} dk = dE$$

$$\Rightarrow F = \hbar \frac{dk_0}{dt} = \frac{dp_0}{dt}$$

# Modèle de Sommerfeld

- L'électron de Sommerfeld:
  - *Accélération de l'électron:*

$$\frac{F}{m} = \frac{dv_g}{dt} = \gamma \quad \text{ici} \quad \vec{F} = -\underbrace{\overrightarrow{\text{grad}}V_0}_{(=0, V_0=\text{cste})} + \underbrace{F_{ext}}_{-qE_{elec}}$$

$$m \frac{dv_g}{dt} = -qE_{elec} \quad \text{et} \quad v_g = \left( \frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} = \frac{1}{\hbar} \left( \frac{dE}{dk} \right)_{k_0}$$

$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{dv_g}{dk} \frac{dk}{dt} = \gamma$$

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)_{k_0} \times \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)_{k_0} \times F = \frac{F}{m}$$

$$F = \hbar \frac{dk_0}{dt}$$

Si on appelle:

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{\hbar^2} \left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)_{k_0} \quad \text{car} \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0$$



$$\frac{dv_g}{dt} = \gamma = \frac{F}{m} \quad \text{avec} \quad \frac{1}{m} = \frac{1}{\hbar^2} \left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)_{k_0}$$

$f'(x)$  Pente

$f''(x)$  concavité

# Modèle de Sommerfeld

$$\frac{dv_g}{dt} = \gamma = \frac{F}{m} \quad \text{avec} \quad \frac{1}{m} = \frac{1}{\hbar^2} \left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)_{k_0}$$

- Nota: la relation  $F=m\gamma$  est toujours vraie. La masse ainsi calculée n'est la masse de la particule que si  $V=V_0=\text{cste}$ , ie que les forces résultantes sont égales aux forces extérieures. Pour un potentiel  $V(x)$  non constant, la relation est identique à condition de remplacer la masse par ***une masse efficace*** ( ou effective  $m^*$ ) qui traduira une réponse (inertie) différente de la particule (voir plus loin!).

## Théorie ondulatoire appliquée aux atomes: l'atome de Bohr – Sommerfeld

- Atome à un électron (Hydrogène):
  - Noyau « lourd », chargé positivement (proton)
    - Il est ~ fixe
  - Électron « léger », chargé négativement
  - Attraction coulombienne entre proton et électron:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

- $e$ : charge de l'électron
- $\epsilon_0$ : permittivité du vide



*Équation de Schrödinger à 3 dimensions*

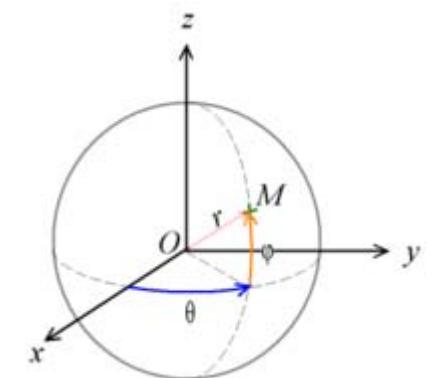
# L'atome de Bohr - Sommerfeld

- *Équation de Schrödinger à 3 dimensions (C. sphériques)*

$$\nabla^2 \varphi(r, \theta, \phi) + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - V(r)) \varphi(r, \theta, \phi) = 0$$

- *Soit:*

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \theta^2} + \\ \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \varphi}{\partial \theta} \right) + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - V(r)) \varphi = 0 \end{aligned}$$



# L'atome de Bohr - Sommerfeld

- On applique la technique de séparation des variables:

$$\varphi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\phi)$$

- On obtient:

$$\frac{\sin^2 \theta}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} + \frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + r^2 \sin^2 \theta \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - V) = 0$$

Fonction de  $\phi$   
uniquement

- On pose

$$\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = -m^2 \longrightarrow \Phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \text{ avec } m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

# L'atome de Bohr - Sommerfeld

- Si on poursuit la résolution (*hors de propos pour ce cours*) pour les 2 autres fonctions, on introduit en plus de  $m$  deux autres constantes  $l$  et  $n$ : on appelle ces entiers les nombres quantiques:
  - $n = 1, 2, 3, \dots \Leftrightarrow nb \text{ quantique principal}$
  - $l = n-1, n-2, \dots, 0 \Leftrightarrow nb \text{ quantique azimutal}$
  - $|m|=l, l-1, \dots, 0 \Leftrightarrow nb \text{ quantique magnétique}$
- **Résultat majeur:**
  - On retrouve les énergies quantifiées de l'atome d'hydrogène

$$E_n = -\frac{m_0 e^4}{(4\pi\epsilon_0 \hbar^2)^2 2n^2} = -\frac{R_y}{n^2} = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV}$$

<http://scienceworld.wolfram.com/physics/HydrogenAtom.html>

# L'atome de Bohr - Sommerfeld

- L'énergie est quantifiée et la distance proton – électron est donnée par le rayon de Bohr  $a_0$

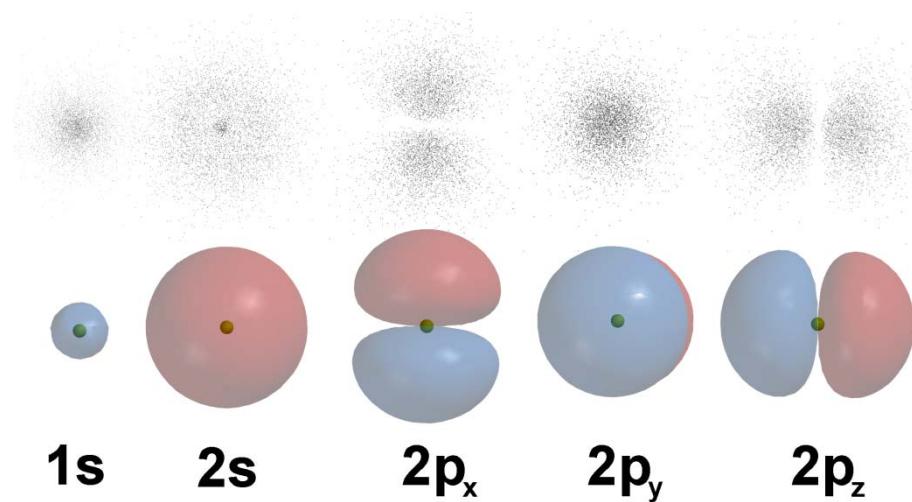
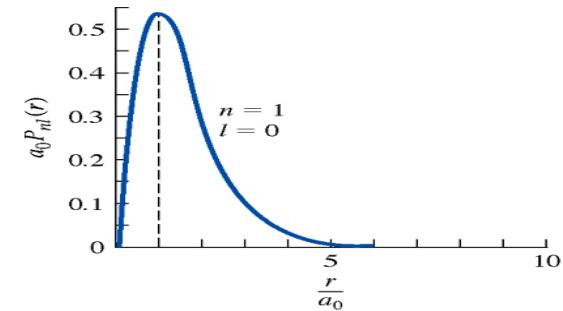
$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_0e^2} = 0,529 \text{ \AA}^0 \text{ pour l'Hydrogène}$$

- *Terminologie courante:*

- État s                     $l=0$
- État p                     $l=1$
- État d                     $l=2$

- *États électriques:*

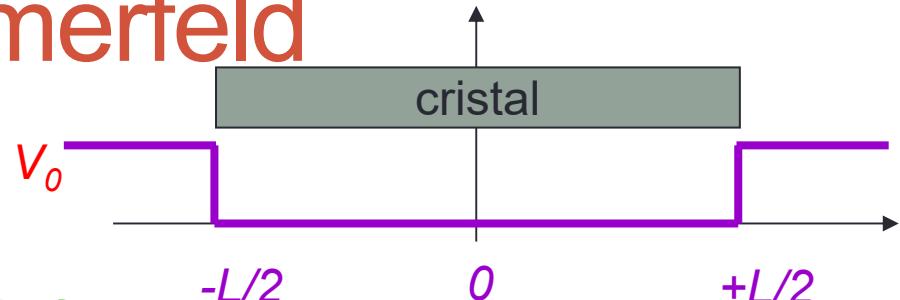
- 1s 2s 2p 3s 3p 3d ...



# Le modèle de Sommerfeld

- Bilan:

- Compréhension de la chaleur spécifique
- Loi d'Ohm (on verra plus loin)
- ...
- Ne permet pas d'expliquer la différence entre un conducteur (métal), un semiconducteur et un isolant



$$\frac{\sigma_{\text{métal}}}{\sigma_{\text{isolant}}} \approx 10^{32} !!!$$



*Il doit y avoir « quelque part » dans le modèle une approximation grossière !*

# CHAPITRE 6

---

Les électrons dans une structure périodique :  
le modèle de Bloch - Brillouin

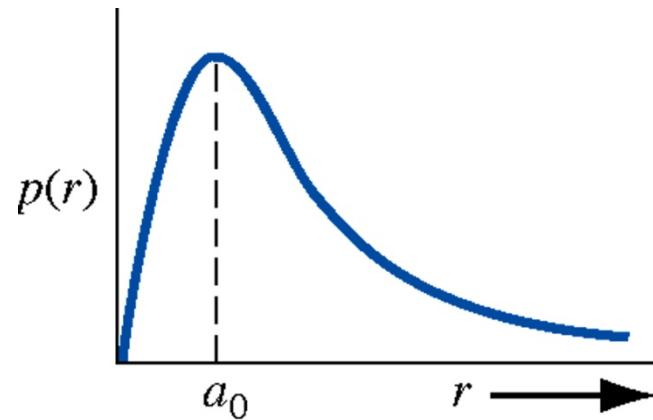
# plan

- Formation des bandes d'énergie
- Introduction de la périodicité du cristal
- Le pseudo vecteur d'onde
- Ondes de Bloch
- Modèle de Kronig-Penney
- Diagramme d'énergie dans l'espace des  $k$

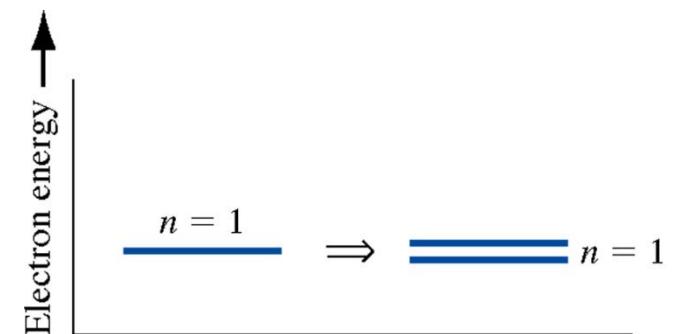
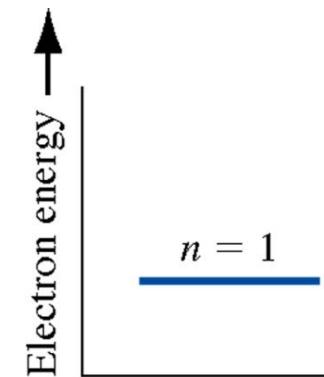
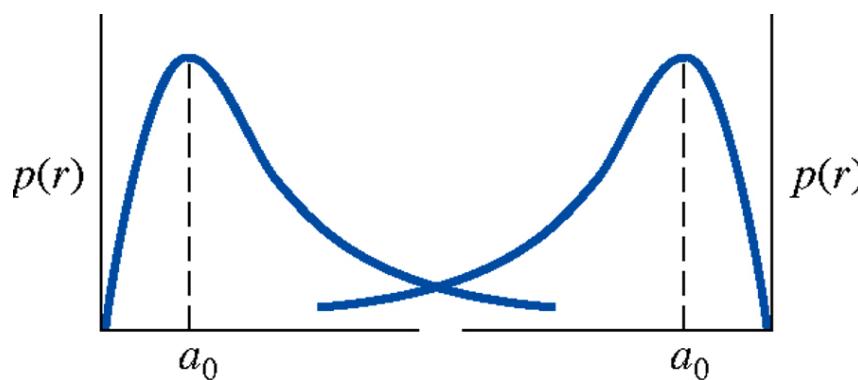
# Formation des bandes d'énergie

- Modèle qualitatif:

1 atome isolé  
d'hydrogène

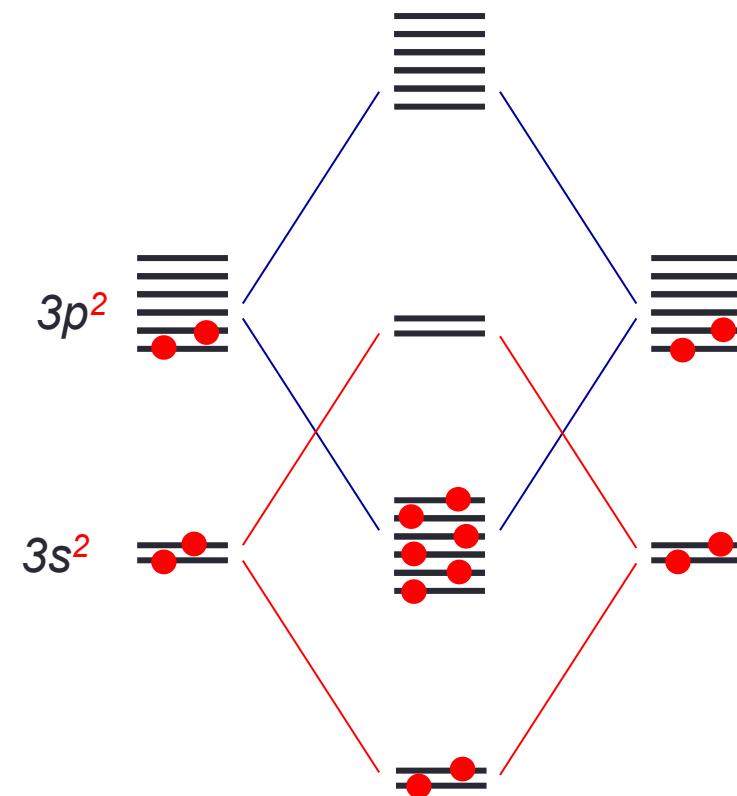
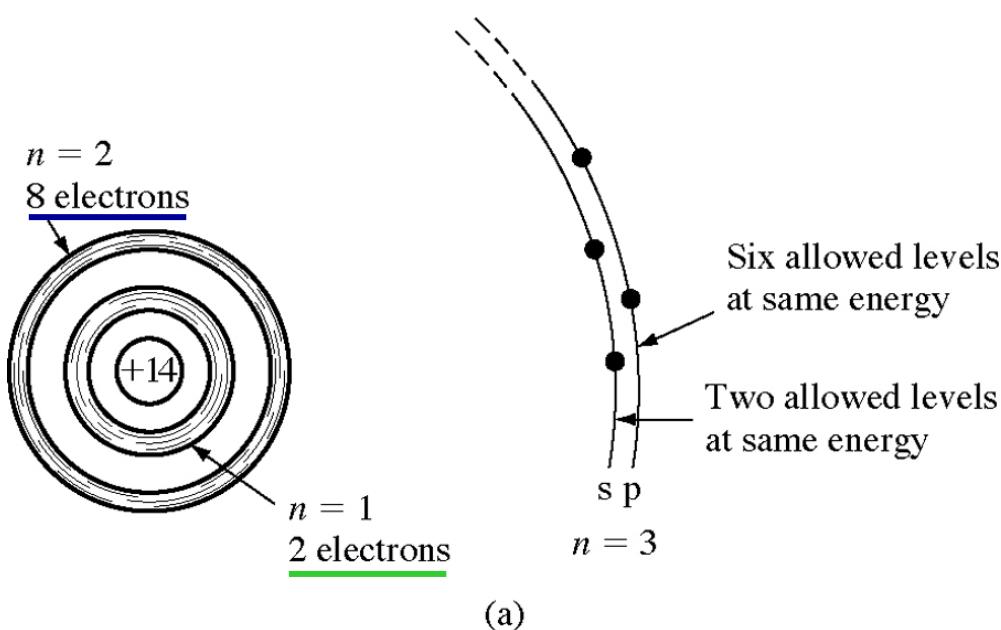


2 atomes  
d'hydrogène  
adjacents

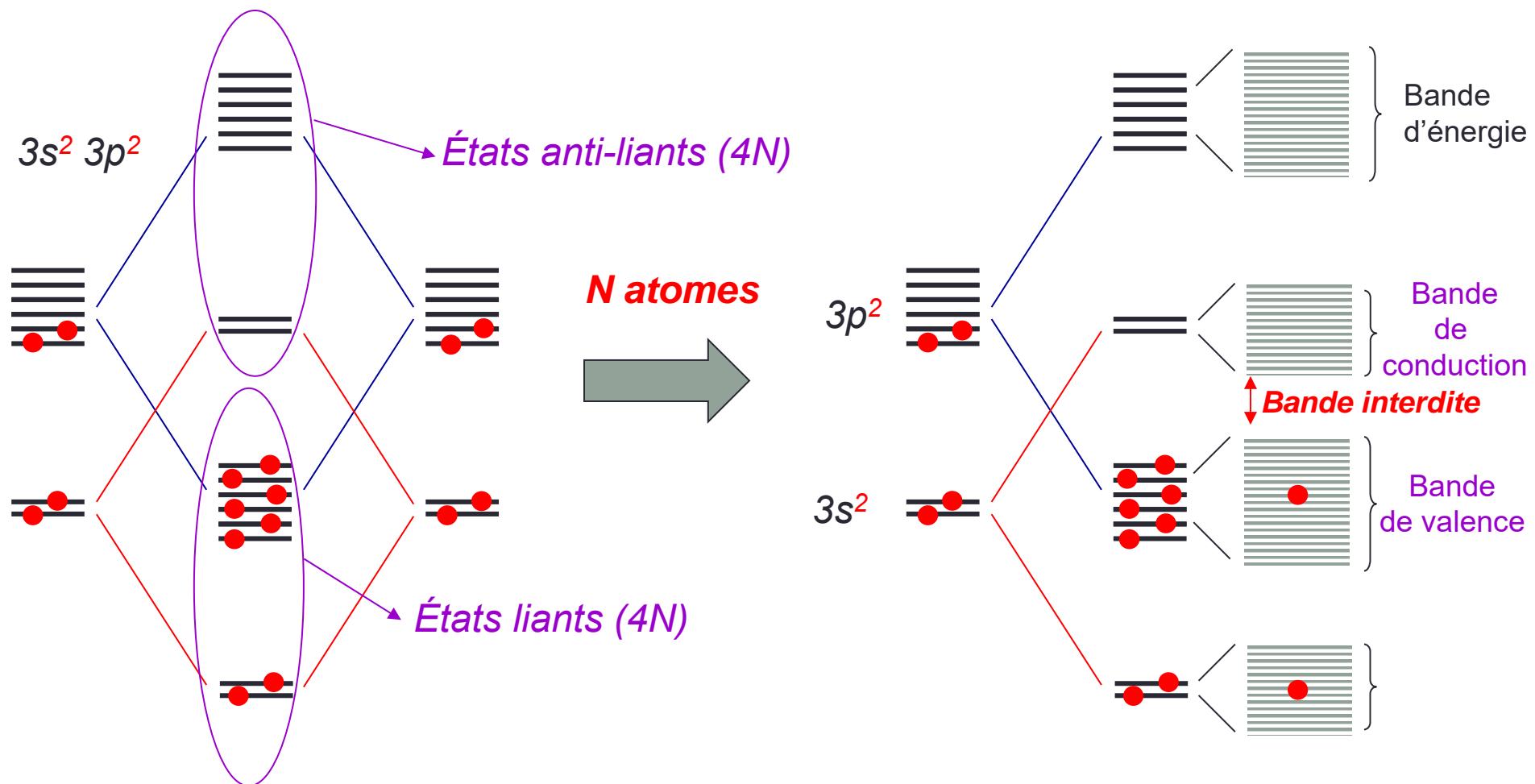


# Formation des bandes d'énergie

- Modèle qualitatif pour le *Silicium*:
  - Structure électronique (14 électrons)
  - $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$

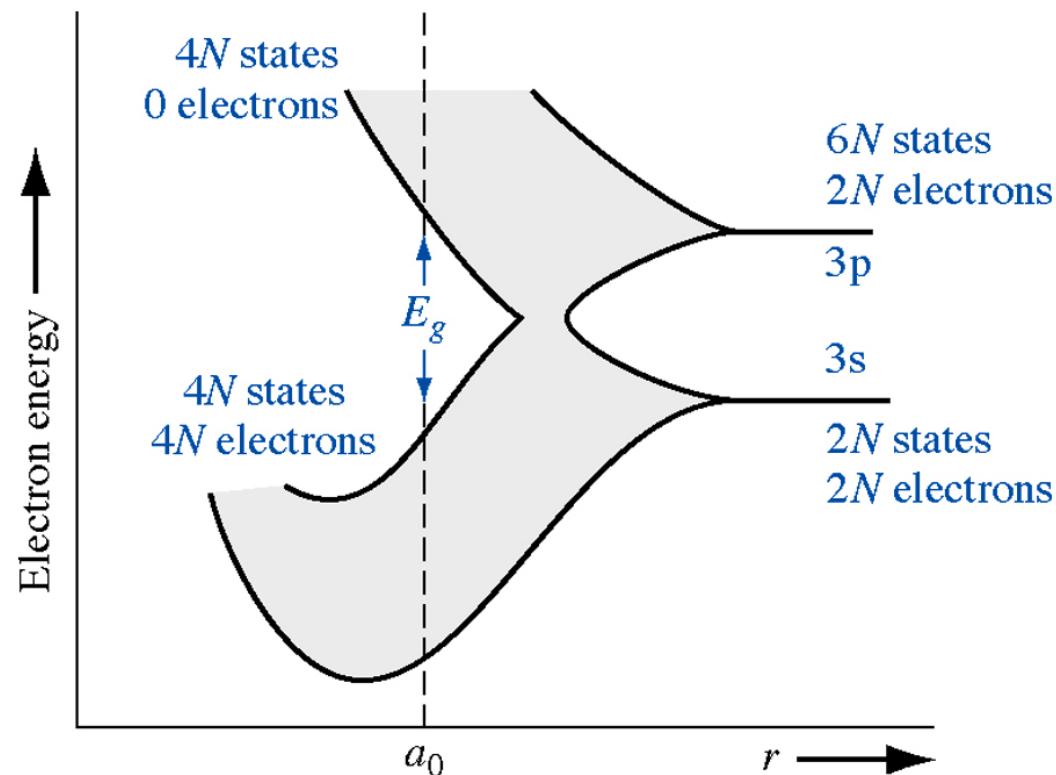


# Formation des bandes d'énergie



# Formation des bandes d'énergie

- La largeur de la bande interdite dépend (entre autre) de la distance inter atomique  $a_0$

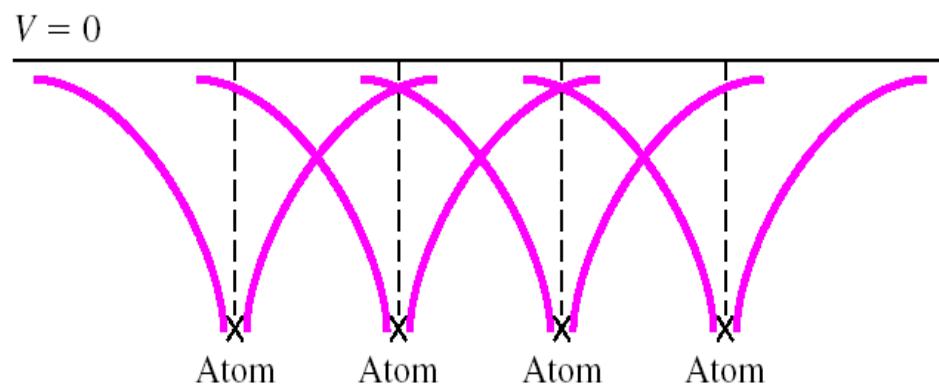
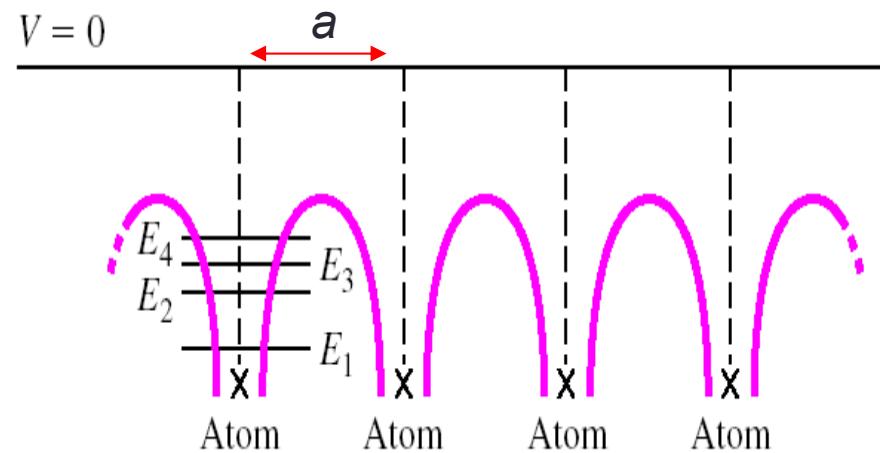
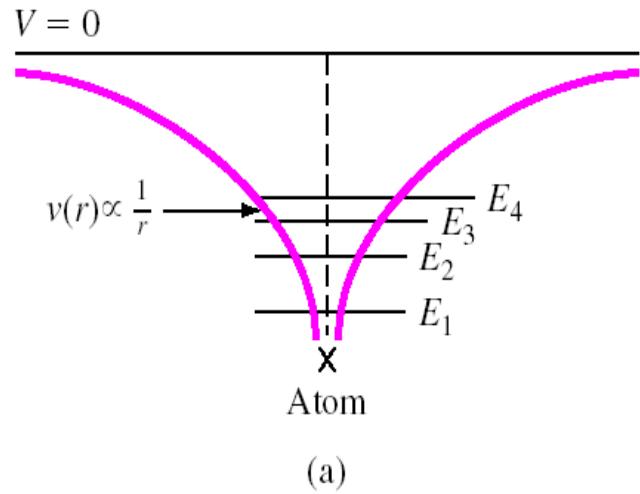


# Formation des bandes d'énergie

- *Modèle « théorique » faisant appel à la mécanique quantique et l'éq. de Schrödinger.*
- *Que doit on rajouter par rapport au modèle de Sommerfeld pour arriver à comprendre la notion de bandes d'énergie permises et interdites?*

*Le potentiel cristallin dans lequel se « balade » l'électron n'est pas constant !*

# Formation des bandes d'énergie



(d'après Neaman)

Le potentiel cristallin est périodique, de période  $a$  (celle du réseau!).

$$V(x) = V(x + a)$$

# Modèle de Bloch Brillouin

- Conditions cycliques de BVK: (permet d'ignorer ce qui se passe en bout de l'échantillon de longueur L)

- Nb d'atomes ?

- À 1D:

$$N = \frac{1}{a} \approx 10^7 \text{ cm}^{-1}$$

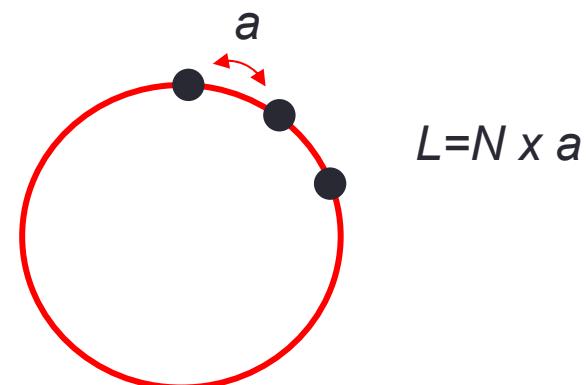
- À 3 D:

$$N = \frac{1^3}{a^3} \approx 10^{21} \text{ cm}^{-3}$$



$$V(x + L) = V(x)$$

$$\psi(x + L) \equiv \psi(x)$$



Le cristal étant périodique de période  $a$ , les propriétés du cristal sont les mêmes en  $x$  et  $x+a$ . Il en est de même pour la fonction d'onde, donc pour la probabilité de présence de l'électron.

# Modèle de Bloch Brillouin

$$dP(x) = |\psi(x)|^2 \quad (1)$$

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

$$(1) \equiv (2) \Rightarrow \psi(x)\psi^*(x) = \psi(x+a)\psi^*(x+a)$$

- Les deux fonctions d'onde ne peuvent être séparées que par un facteur de phase:

$$\psi(x+a) = e^{i\theta}\psi(x), \quad \psi(x+2a) = e^{i2\theta}\psi(x), \dots$$

$$\Rightarrow \psi(x+Na) = e^{iN\theta}\psi(x) = \psi(x)$$

$$\Rightarrow e^{iN\theta} = 1 \Leftrightarrow N\theta = p2\pi \Rightarrow \theta = p\frac{2\pi}{N} = p\frac{2\pi a}{Na} = p\frac{2\pi}{L}a$$

# Modèle de Bloch Brillouin

- Modification d'écriture: introduction du pseudo vecteur d'onde  $K$ .
  - Si on pose  $K = p \frac{2\pi}{L}$ , alors on peut écrire:
$$\psi(x + a) = e^{iKa} \psi(x)$$
  - $K$  n'est pas un vecteur d'onde; il ne traduit que le déphasage entre 2 ondes de matière qui représentent la particule.
  - $K$  est quantifié. Il prend  $N$  valeurs consécutives distantes de  $\frac{2\pi}{L}$  et prend les mêmes valeurs à  $\frac{2\pi}{a}$  près.

# Modèle de Bloch Brillouin

- Onde de Bloch:

$$\psi(x+a) = e^{iKa} \psi(x) = e^{iK(a+x)} e^{-iKx} \psi(x)$$

posons  $u(x) = e^{-iKx} \psi(x) \Leftrightarrow \psi(x) = u(x)e^{iKx}$

et

$$\begin{aligned} u(x) &= e^{-iKx} \psi(x) = e^{-iK(x+a)} e^{iKa} \psi(x) = e^{-iK(x+a)} \psi(x+a) \\ \Rightarrow u(x) &= u(x+a) \end{aligned}$$

- *Les fonctions d'onde stationnaire d'un électron dans un potentiel périodique sont des fonctions de Bloch de la forme (à 1D):*

$$\psi(x) = u(x)e^{iKx} \quad \forall x \text{ avec } u(x) = u(x+a)$$

# Modèle de Bloch Brillouin

- *Différence onde plane / onde de Bloch:*
  - Onde plane:

$$\phi(x) = A e^{ikx} \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} \text{ et } \varphi = \frac{2\pi}{\lambda} x = kx$$

- Onde de Bloch:

$$\phi(x) = u(x) e^{iKx} \quad K = p \frac{2\pi}{L} \text{ et } \varphi = Kx + \underbrace{\arg(u(x))}_{inconnu}$$

# Modèle de Bloch Brillouin

- La fonction d'onde de Bloch doit être injectée dans l'équation de Schrödinger  $\Leftrightarrow$  la résolution impose de connaître  $u(x)$  !

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (u(x)e^{ikx}) + V_0 \times u(x)e^{ikx} = E \times u(x)e^{ikx}$$

- Pour résoudre le problème il faut connaître parfaitement la forme du potentiel cristallin (pas trivial!). Un modèle simplifié devrait nous permettre d'avoir une idée de la structure de bandes d'énergie

# Modèle de Kronig et Penney

R.D. Kronig and W.G. Penney, "Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices",  
*Proceedings of the Royal Society London* **130**, 499 (1931)

*Introduction.*—Through the work of Bloch our understanding of the behaviour of electrons in crystal lattices has been much advanced. The principal idea of Bloch's theory is the assumption that the interaction of a given electron with the other particles of the lattice may be replaced in first approximation by a periodic field of potential. With this model an interpretation of the specific heat,\* the electrical and thermal conductivity,† the magnetic susceptibility,‡ the Hall effect,§ and the optical properties|| of metals could be obtained. The advantages and limitations inherent in the assumption of Bloch will be much the same as those encountered when replacing the interaction of the electrons in an atom by a suitable central shielding of the nuclear field, as in the work of Thomas and Hartree.

\* Bloch, 'Z. Physik,' vol. 52, p. 555 (1928).

† Bloch, 'Z. Physik,' vol. 52, p. 555 (1928), vol. 53, p. 216 (1929), and vol. 59, p. 208 (1930); Peierls, 'Ann. Physik,' vol. 4, p. 121 (1930), and vol. 5, p. 244 (1930).

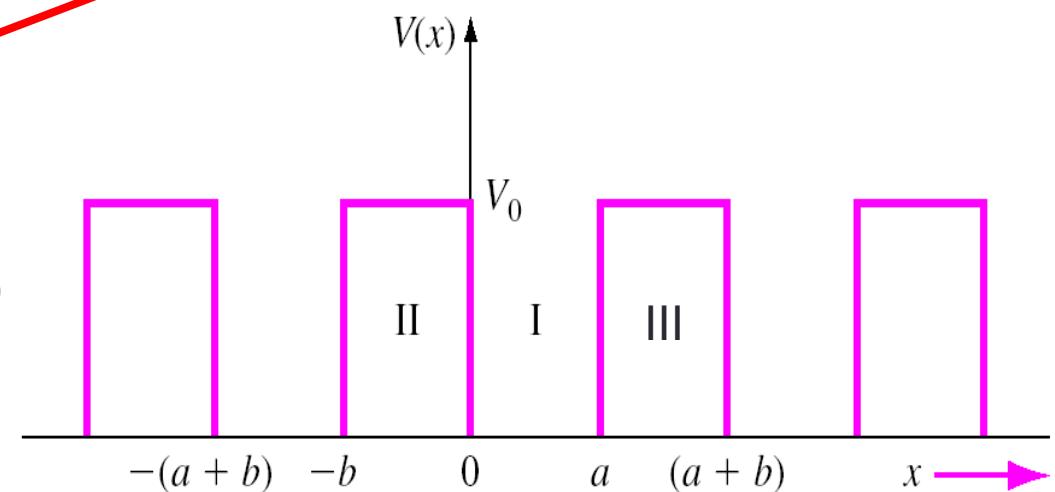
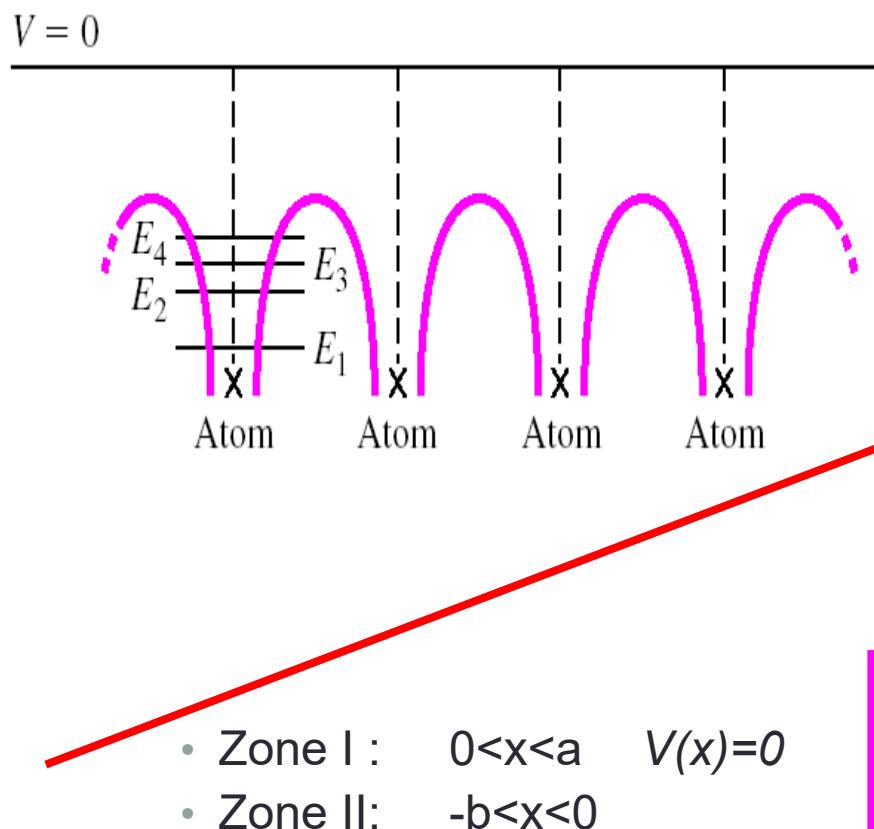
‡ Bloch, 'Z. Physik,' vol. 53, p. 216 (1929).

§ Peierls, 'Z. Physik,' vol. 53, p. 255 (1929).

|| Kronig, 'Proc. Roy. Soc.,' A, vol. 124, p. 409 (1929).

# Modèle de Kronig et Penney

- On approxime le potentiel périodique cristallin par un potentiel périodique en créneaux.



# Modèle de Kronig et Penney

- Potentiel périodique  $\Leftrightarrow$  Ondes de Bloch
- Les fonctions (et leurs dérivées) ne diffèrent que d'un facteur de phase dans les régions II et III :

$$\phi_{III}(x) = e^{iK(a+b)} \phi_{II}(x - (a + b))$$

$$\phi_{III}(a) = \phi_{II}(a - a - b) e^{iK(a+b)} = \phi_{II}(-b) e^{iK(a+b)}$$

- Électrons liés au cristal  $\Leftrightarrow E < V_0$
- Potentiel  $V(x)$  fini partout  $\Leftrightarrow$  la fonction d'onde et sa dérivée première doivent être continues partout.

# Modèle de Kronig et Penney

- Résolution de l'équation de Schrödinger:

- Région I (dans le puits):

$$\phi_I(x) = A e^{i\beta x} + B e^{-i\beta x} , \quad \beta = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

- Région II (dans la barrière):

$$\phi_{II}(x) = C e^{\alpha x} + D e^{-\alpha x} , \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

- Région III (dans la barrière):

$$\phi_{III}(x) = E e^{i\beta x} + F e^{-i\beta x} , \quad \beta = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

- Continuité de la fonction d'onde et sa dérivée première en  $a$  et en  $0$ :  
**attention au déphasage !**

# Modèle de Kronig et Penney

- On obtient un système de 4 équations ( 2 par la continuité de la fonction d'onde et 2 par la dérivée première) à 4 inconnues (A,B, C et D)
- Solutions non triviales ( A=B=C=D=0)ssi le déterminant du système est nul.
- On obtient (laborieux mais faisable!!)

$$\cos k(a+b) = \frac{\alpha^2 + \beta^2}{2\alpha\beta} \sin(\beta a) \sinh(\alpha b) + \cos(\beta a) \cosh(\alpha b)$$

*Rappel !! : k est le pseudo vecteur d'onde !!*

# Modèle de Kronig et Penney

- Que fait on de cette équation?

$$\cos k(a+b) = \frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta} \sin(\beta a) \sinh(\alpha b) + \cos(\beta a) \cosh(\alpha b)$$

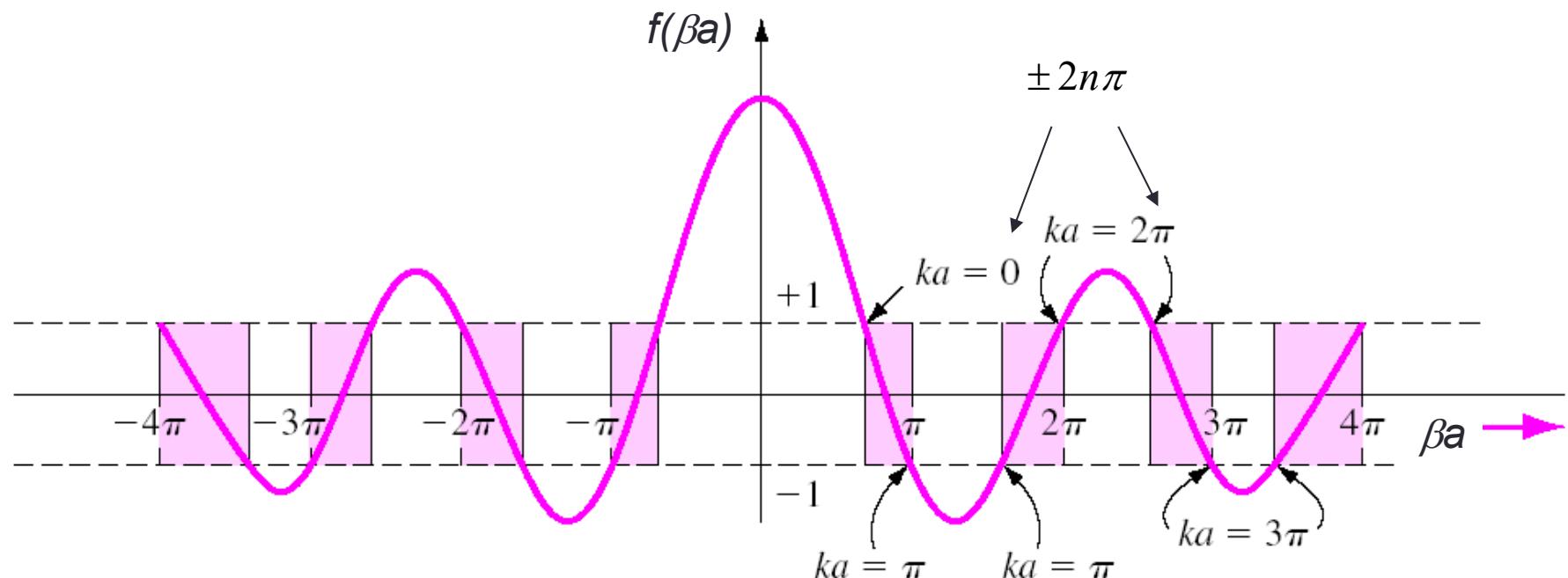
- Résolution numérique ou graphique de façon à obtenir une relation entre  $E$ ,  $V_0$  et  $k$  le pseudo vecteur d'onde.
- De façon à se rapprocher de la réalité et rendre plus « visible » la résolution graphique, on fait tendre la barrière de potentiel vers des Dirac ( $b \rightarrow 0$  et  $V_0 \rightarrow \infty$ ), mais avec  $bV_0 = \text{cste finie}$ :

$$P \frac{\sin \beta a}{\beta a} + \cos \beta a = \cos ka \quad \text{avec } P = \frac{m V_0 b a}{\hbar^2}$$

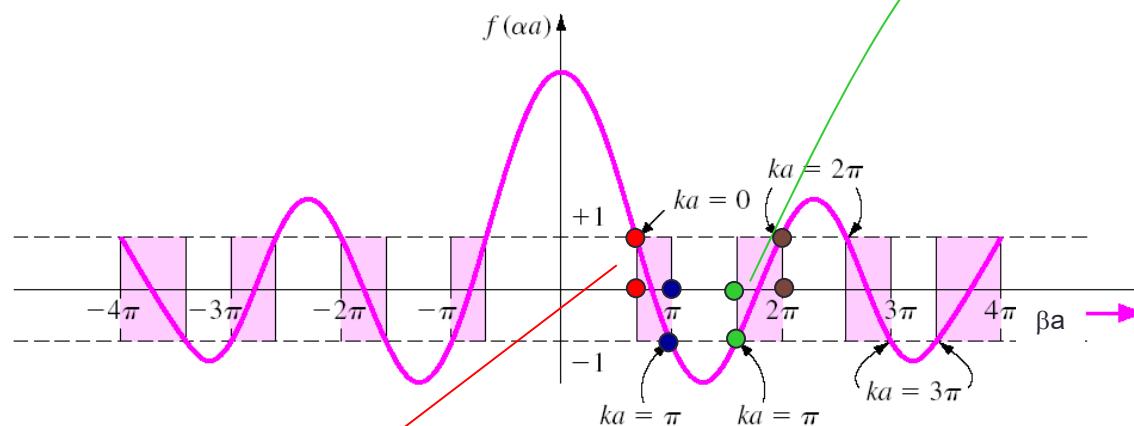
# Modèle de Kronig et Penney

- Diagramme  $E(k)$

$$P \frac{\sin \beta a}{\beta a} + \cos \beta a = f(\beta a) = \cos(ka)$$



# Diagramme $E(k)$



$$\beta = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \Leftrightarrow E = \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m}$$

- $ka=0 \Leftrightarrow$

$$1 = P \frac{\sin \beta a}{\beta a} + \cos \beta a$$

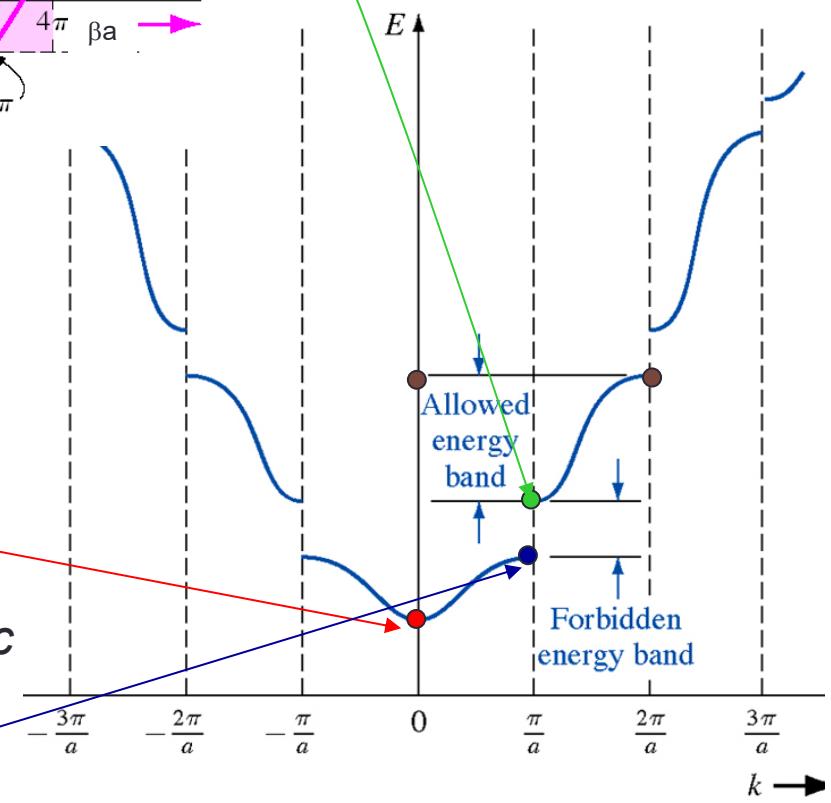
On en déduit une valeur de  $\beta$  donc de l'énergie  $E_1$ .

- 

- $ka=\pi \Leftrightarrow \beta a=\pi$

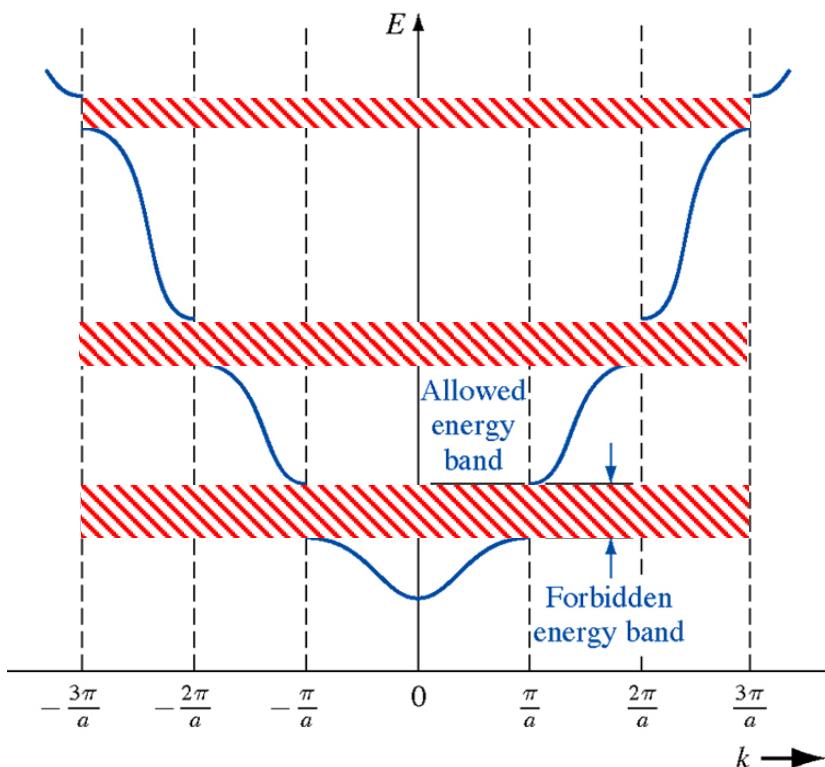
On en déduit une valeur de  $\beta=\pi/a$  donc de l'énergie  $E_2$ .

$$\sqrt{\frac{2mE_2}{\hbar^2}} = \frac{\pi}{a}$$



# Bandes d'énergie

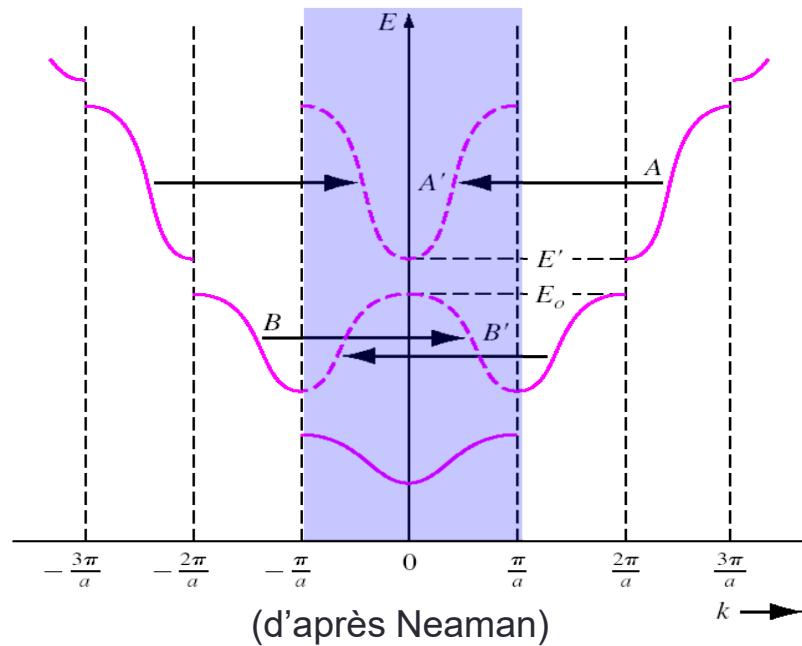
- Le fait que la particule se déplace dans un potentiel périodique induit l'apparition de bandes d'énergie séparées les unes des autres par des bandes d'énergie interdite (rouge).



- Les électrons se « placent » sur les bandes d'énergies permises
- Il n'est pas nécessaire de tracer le diagramme sur tout le domaine de variation de  $k$ :
  - Périodicité en  $2n\pi$

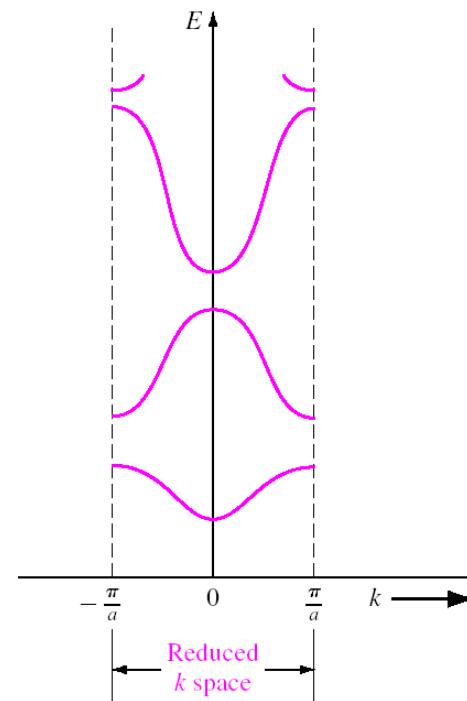
$$\cos ka = \cos(ka + 2n\pi) = \cos(ka - 2n\pi)$$

# Schéma de zone réduite



Attention !!!!

$$k = p \frac{2\pi}{L}$$

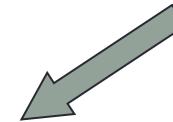
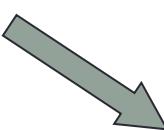


Notion de Gap (bande interdite) direct : ils se produisent alternativement en milieu de zone en  $k=0$  et en bord de zone en  $k=\pm\pi/a$ . Chacun de ces gaps est dit direct en  $k$  car la discontinuité d'énergie se fait sans changer la valeur de  $k$ .

# Limites d'énergie permise

- $\cos(ka) = \pm 1 \Leftrightarrow ka = n\pi \Leftrightarrow$
- on pose  $P = \beta a \tan(\varphi)$

$$P \frac{\sin \beta a}{\beta a} + \cos \beta a = \pm 1$$



$$\cos(\beta a - \varphi) = \pm \cos \varphi$$

$$\cos(\beta a - \varphi) = + \cos \varphi$$

$$\bullet \beta a = 2n\pi : \quad \underline{E_{1n}} = \frac{h^2 n^2}{2ma^2}$$

$$\bullet \beta a = 2n\pi + 2\varphi : \quad \underline{E_{2n}} = \frac{h^2}{2ma^2} \left(n + \frac{\varphi}{\pi}\right)^2$$

$$\cos(\beta a - \varphi) = - \cos \varphi$$

$$\bullet \beta a = (2n+1)\pi : \quad \underline{E_{3n}} = \frac{h^2}{2ma^2} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2$$

$$\bullet \beta a = (2n+1)\pi + 2\varphi : \quad \underline{E_{4n}} = \frac{h^2}{2ma^2} \left(n + \frac{1}{2} + \frac{\varphi}{\pi}\right)^2$$



Limite supérieure



Limite inférieure

# $E(k)$ au voisinage d'un extremum

- Étude de la fonction:  $\left. \frac{dE}{dk} \right|_{0, \pm \frac{\pi}{a}}$  ?
- On n'a pas de relation directe entre  $E$  et  $k$ !

$$\frac{dE}{dk} = \frac{dE/d\beta}{d\beta/dk} \quad ??? \quad \text{mais} \quad P \frac{\sin \beta a}{\beta a} + \cos \beta a = \cos ka$$

**OK !**

$$\frac{d[\cos ka]}{d\beta} = \frac{d[\cos ka]}{dk} \frac{dk}{d\beta} = \frac{d[P \frac{\sin \beta a}{\beta a} + \cos \beta a]}{d\beta}$$

→ On montre (voir TD!) qu'en centre de zone et en bord de zone,

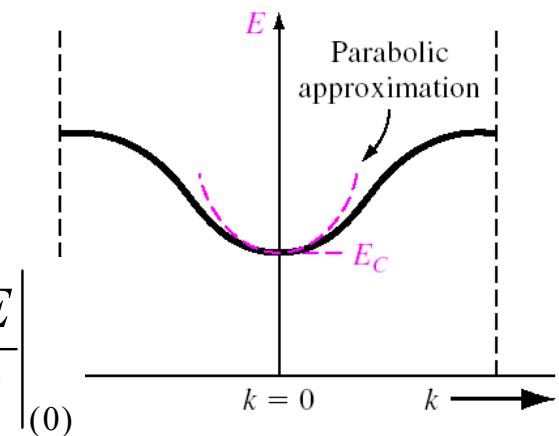
$$\left. \frac{dE}{dk} \right|_{0, \pm \frac{\pi}{a}} = 0$$

# Masse effective de densité d'états

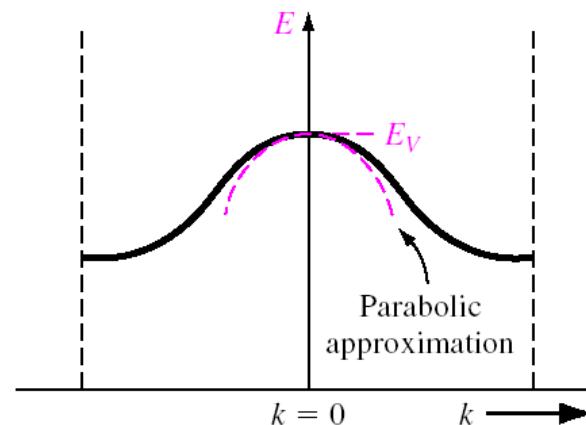
- Au voisinage d'un extremum: (DL à l'ordre 2)

$$E_k = E(0) + \underbrace{\frac{dE}{dk} \Big|_{k=0}}_{=0} (k - 0) + \frac{1}{2!} \frac{d^2 E}{dk^2} \Big|_{k=0} (k - 0)^2$$

$$E_k = E_{(0)} + \frac{1}{2} \frac{d^2 E}{dk^2} \Big|_{k=0} k^2 = E_{(0)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \text{ avec } \frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \Big|_{(0)}$$



*Dans un certain intervalle autour des extrema de bandes, on a le droit de confondre la vraie courbe par une parabole: c'est l'approximation de la masse effective*



# Masse effective de densité d'états

- La masse effective est un paramètre qui relie les résultats de la mécanique quantique aux équations de la mécanique classique (Newton).
- Le fait que la particule se déplace dans un potentiel périodique modifie son inertie  $\Leftrightarrow$  masse effective:

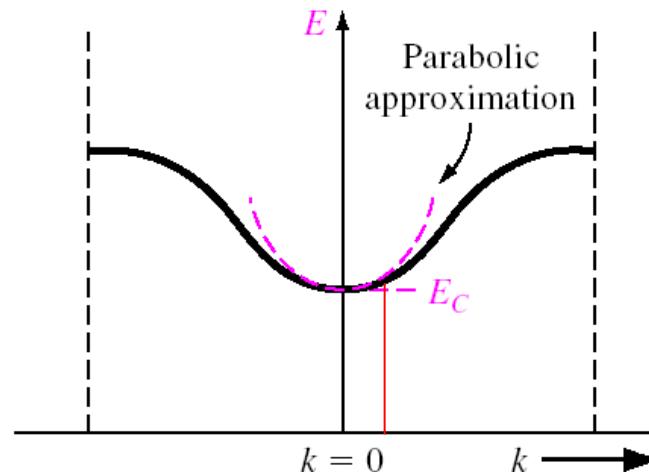
$$\frac{dv_g}{dt} = \gamma = \frac{F}{m^*} \quad \text{avec} \quad \frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)_{k_0}$$

# Signe de la masse effective

- Bas de bande:

$$E_k = E_{(0)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1^*}$$

- $E_k > E_{(0)} = E_{\text{minimum}}$

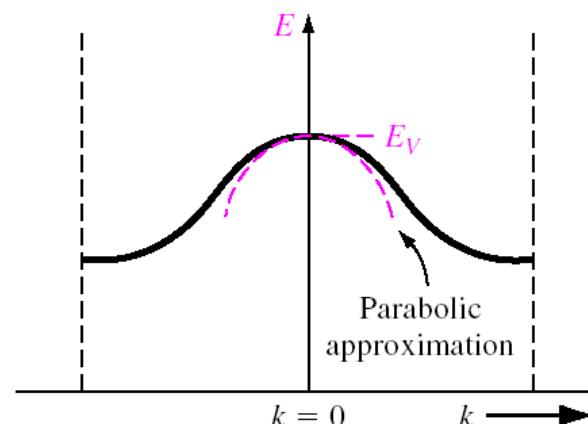


**1° Règle:** la masse efficace en bas de bande est un coefficient positif

- Sommet de bande:

$$E_k = E_{\text{Max}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_2^*}$$

**2° Règle:** la masse efficace en sommet de bande est un coefficient négatif

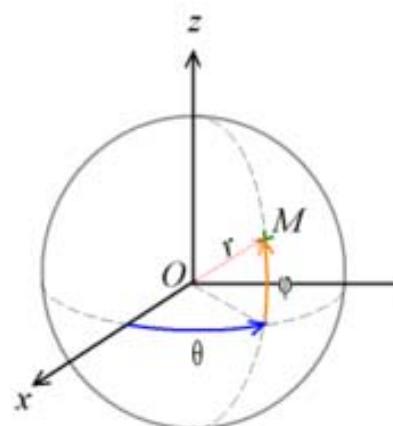


# Densité d'états (approx. $m^*$ )

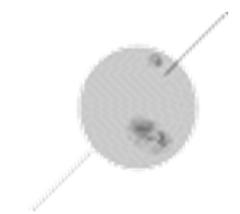
- le courant  $\Leftrightarrow$  déplacement de charges
- Nécessité de dénombrer le nombre de charge dans les bandes (conduction ou valence)
- Ce nombre est fonction du nombre d'états énergétiques ou états quantiques disponibles
- Attention: le principe d'exclusion de Pauli

# Densité d'états (approx. m\*)

- Avant de poursuivre:
  - Introduction de la notion de spin de l'électron:



$$\varphi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\phi)$$



- En plus des trois nombres quantiques (principal, azimuthal et magnétique), l'électron possède une propriété supplémentaire qui se traduit par un moment angulaire intrinsèque quantifié ( $\pm \frac{1}{2}$ ) auquel on attribue un **quatrième** nb quantique de spin,  $s$ , indépendant des 3 autres.
- **Principe d'exclusion de Pauli** (dans les solides): on ne peut trouver deux électrons dans le solide ayant le même état d'énergie ( mêmes nombres quantiques).

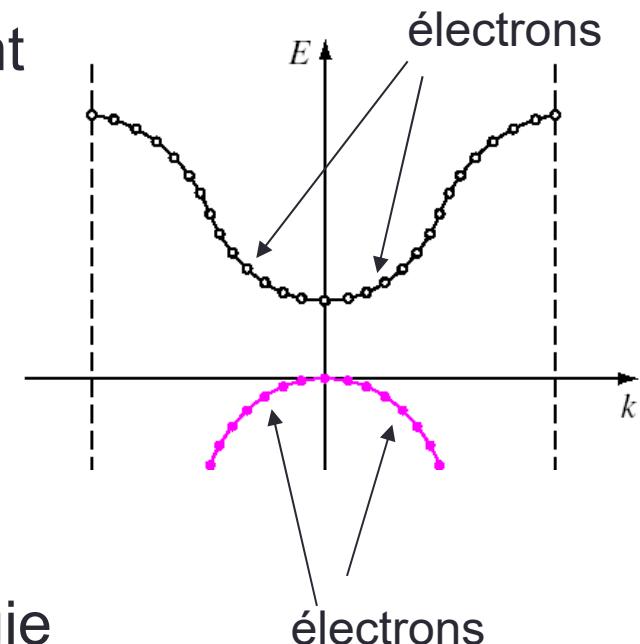
# Densité d'états (approx. $m^*$ )

- Cristal unidimensionnel de longueur L:
- Les états permis pour les électrons sont discrets séparés de  $\Delta k = \frac{2\pi}{L}$
- Autour du minimum ici, on approxime  $E(k)$  par:

$$E = E_{\min} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

- La densité d'états est le nombre de modes (états, places) par unité d'énergie et de longueur ( $L=1!$ ):

$$g_{1D}(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi\hbar} (E - E_{\min})^{-1/2} \quad J^{-1} m^{-1}$$



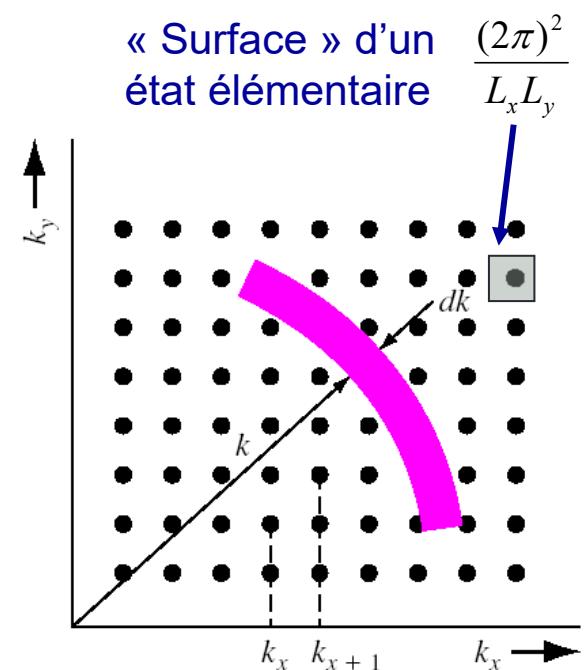
# Densité d'états (approx. $m^*$ )

- Cristal 2D de longueur  $L_x$  et  $L_y$ :
- Les états permis pour les électrons sont toujours quantifiés.
- L'énergie en bord de bande est toujours approximée par:

$$E = E_{\min} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

- La densité est alors donnée par:

$$g_{2D}(E) = \frac{dN}{dE} = L_x L_y \frac{m^*}{\pi \hbar^2} J^{-1} \quad \text{ou} \quad \frac{m^*}{\pi \hbar^2} J^{-1} m^{-2}$$



} *Indépendant de l'énergie !*

# Densité d'états (approx. $m^*$ )

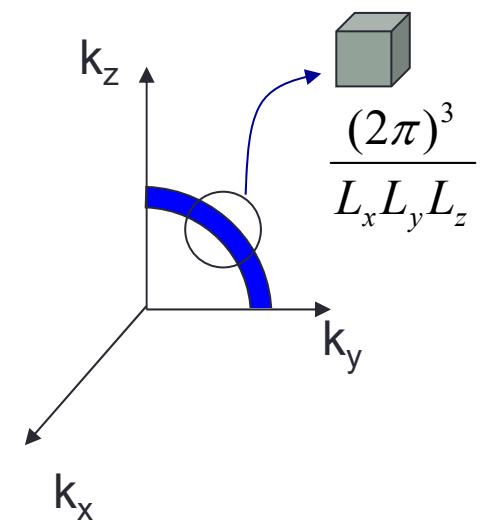
- Cristal 3D de longueur  $L_x$   $L_y$  et  $L_z$ :
- Les états permis pour les électrons sont toujours quantifiés.
- L'énergie en bord de bande est toujours approximée par:

$$E_{\vec{k}} = E_{\min} + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = E_{\min} + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*}$$

- La densité est alors donnée ( $L_x L_y L_z = 1$  ie par unité de volume):

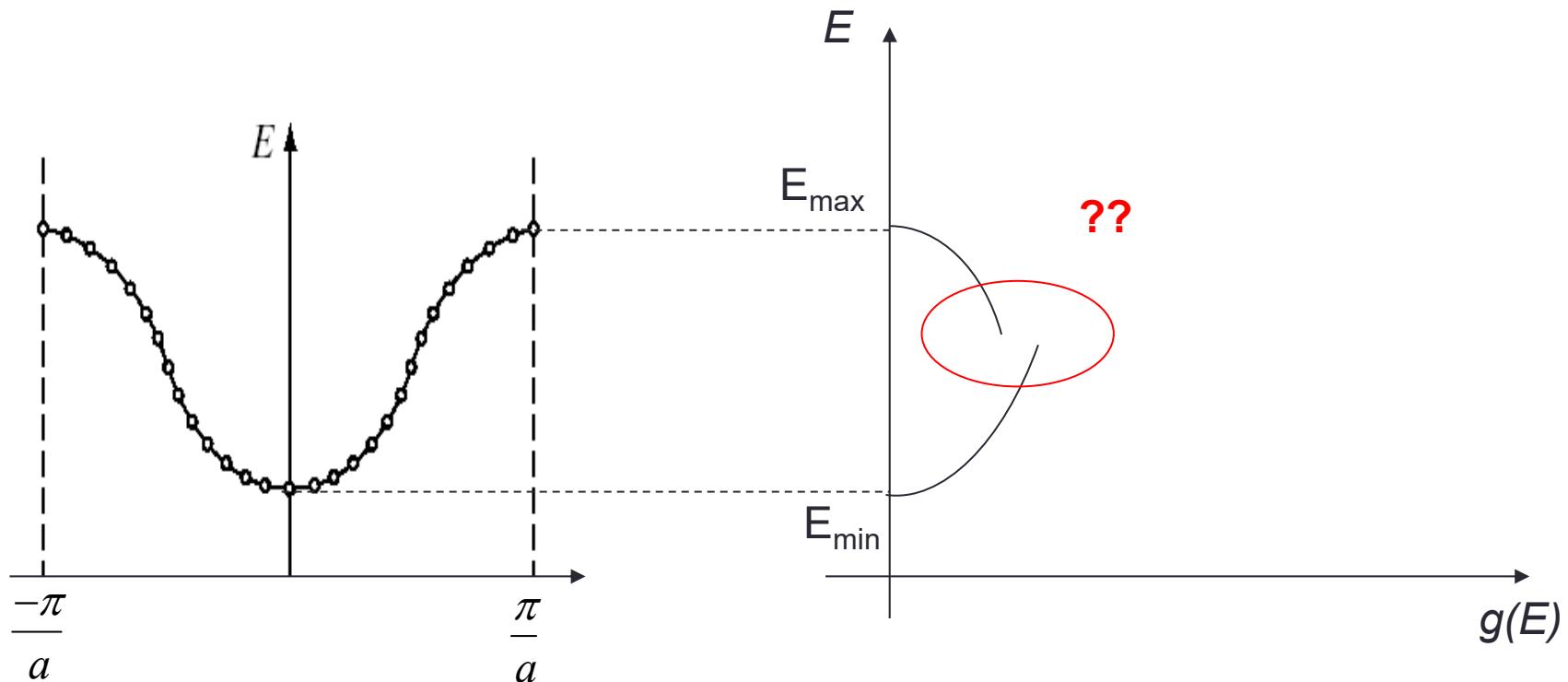
$$g_{3D}(E) = \frac{dN}{dE} = 4\pi \left( \frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_{\min})^{1/2} J^{-1} m^{-3}$$

———— = —————  $(E_{\max} - E)^{1/2}$



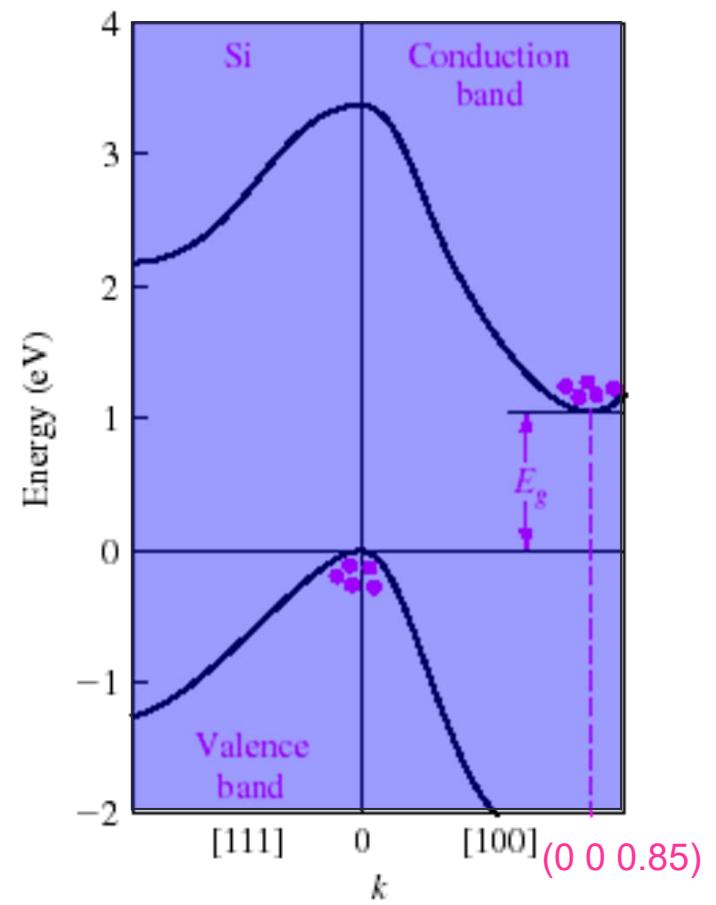
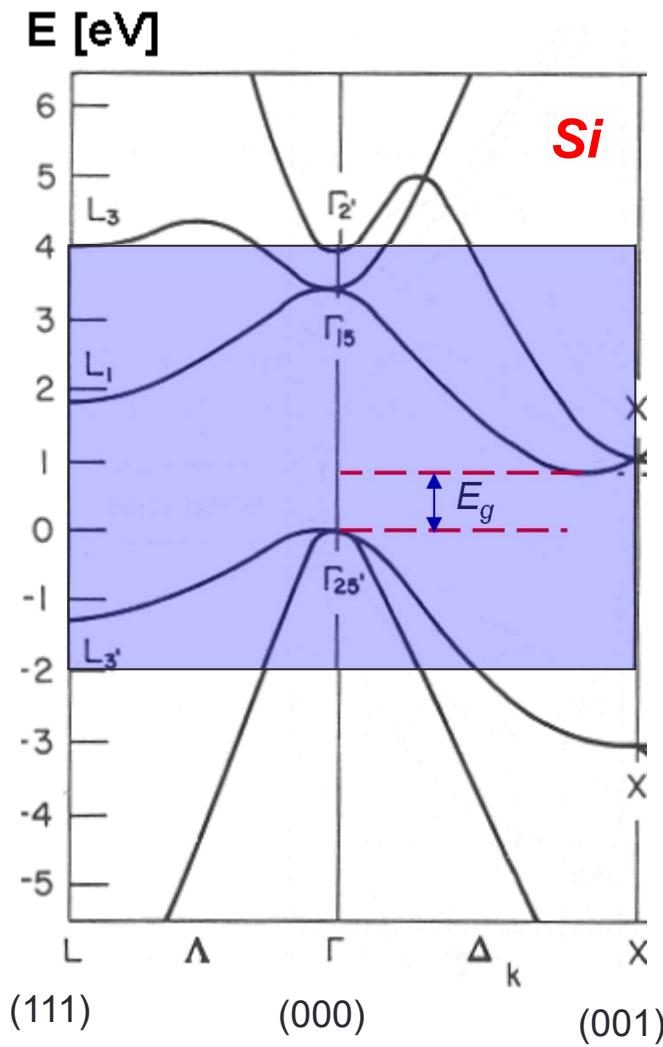
← bas de bande  
← sommet de bande

# Densité d'états 3D

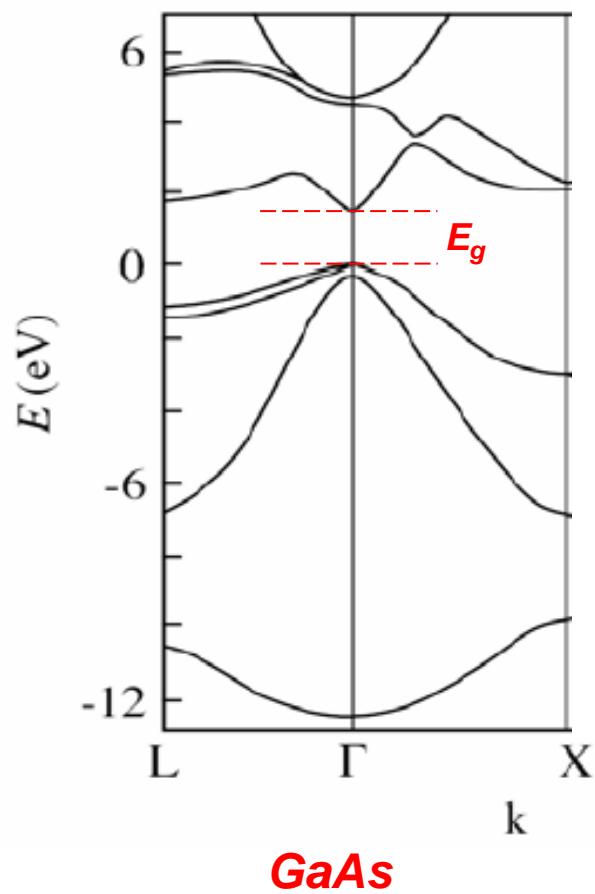


*Les masses effectives ne sont pas les mêmes et  
l'approximation de la  $m^*$  n'est valable qu'en bord de bande !*

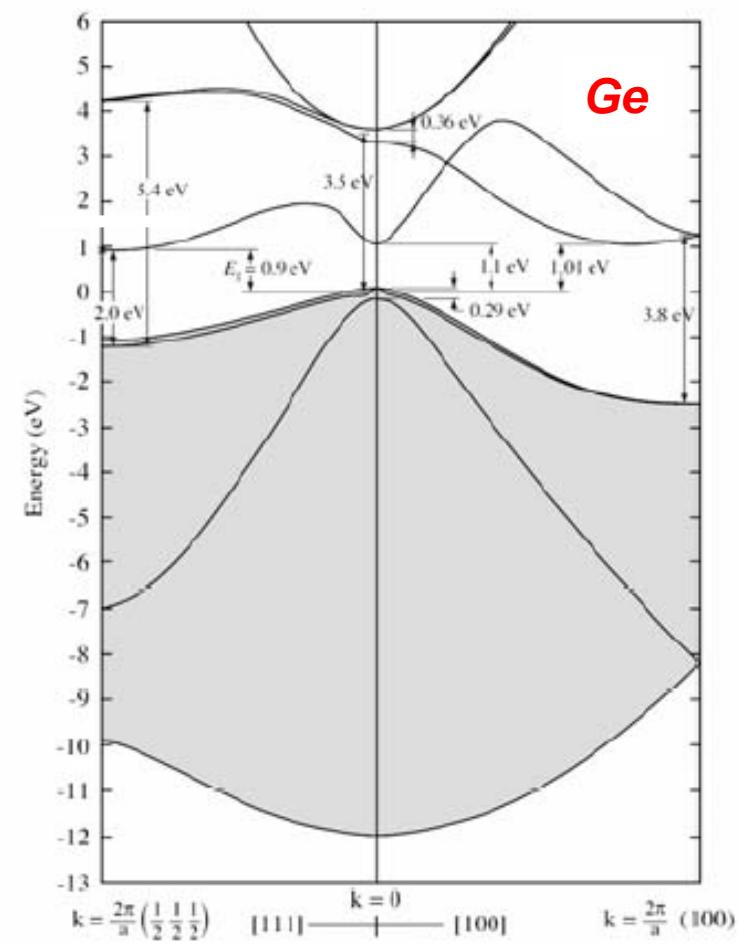
# Structure de bande réelle!



# Structure de bande réelle!



**GaAs**



# synthèse

- Cristal  $\Leftrightarrow$  potentiel périodique
  - Apparition de structure en bande d'énergie
  - Notion de bande interdite



*Cela suffit-il à expliquer la différence entre métal et isolant (ou semiconducteur) ?  
Suite au prochain chapitre*

# CHAPITRE 7

---

Courant dans les solides :  
cas particulier des semiconducteurs

# Courant de conduction dans le « cristal » de Bloch - Brillouin

- Vecteur densité de courant:
  - C'est quoi la densité de courant: c'est un déplacement de charges électriques par unité de temps et de surface

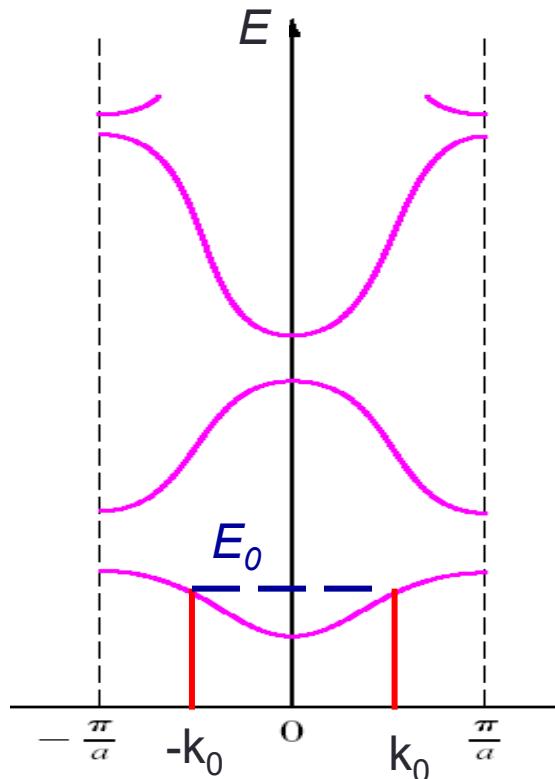
$$\vec{j} = -q \sum_i n_i \vec{v}_i = -q \sum_i \vec{v}_i$$

- À 1 dim:  
avec  $n_i$  le nombre (densité linéique) d'électrons de vitesse  $\vec{v}_i$

$$\bar{j} = -q \sum_i \bar{v}_i$$

# Courant de conduction dans le « cristal » de Bloch - Brillouin

- Contribution des diverses bandes au courant électrique
  - Bandé pleine



- Sur chacune des valeurs permises de  $k_0$  on peut former un paquet d'ondes
- La bande est dite pleine si toute les valeurs de  $k_0$  sont utilisées (niveau d'énergie occupé).
- $E(k)$  est paire en  $k \Leftrightarrow E(-k_0) = E(+k_0) \Leftrightarrow$  la probabilité de trouver un électron en  $k_0$  ou en  $-k_0$  est identique (démontré chapitre suivant)
- Vitesse de la particule  $v_g = \frac{1}{\hbar} \left( \frac{dE}{dk} \right)_{k_0}$  impaire en  $k \Leftrightarrow v_g(k) = -v_g(-k)$

$$\bar{j} = -q \sum_i \bar{v}_i = 0 \quad (\text{la bande est pleine})$$

# Courant de conduction dans le « cristal » de Bloch - Brillouin

- Règle 1: la contribution au courant électrique d'une bande pleine est toujours égale à zéro.
- Règle 2: la contribution au courant électrique d'une bande vide est égale à zéro.
- Corollaire: le courant électrique est dû aux bandes incomplètement remplies

R1. 满带对电流贡献为 0.

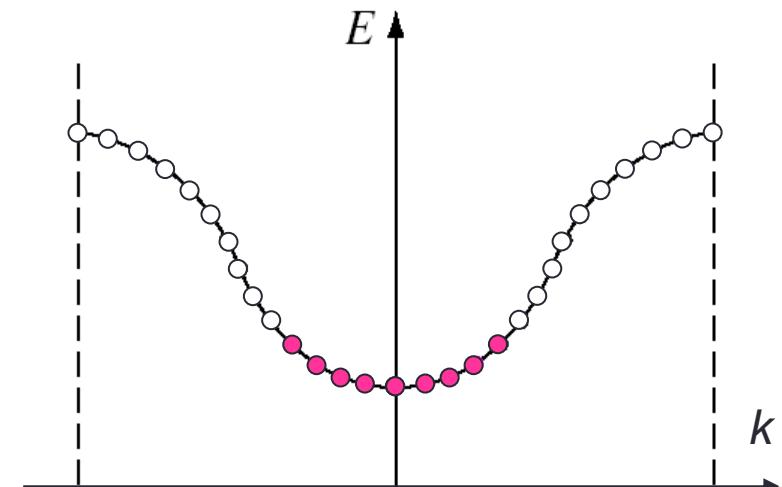
R2. 空带对电流贡献为 0.

Cor. 电流是由于带填充不完全造成的.

# Contribution à $J$ d'une bande incomplètement remplie

- Cristal parfait,  $\mathcal{E}_{elec} = 0$  et T uniforme.
  - On est à l'équilibre thermodynamique
  - Les probabilités d'occupation des états d'énergie  $k$  et  $-k$  sont identiques

$$\bar{j} = -q \sum_i \bar{v}_i = 0 \quad [v_g(k) = -v_g(-k)]$$



- Résultat non surprenant: pas de champ électrique  $\Leftrightarrow$  pas de courant de conduction!

# Contribution à $J$ d'une bande incomplètement remplie

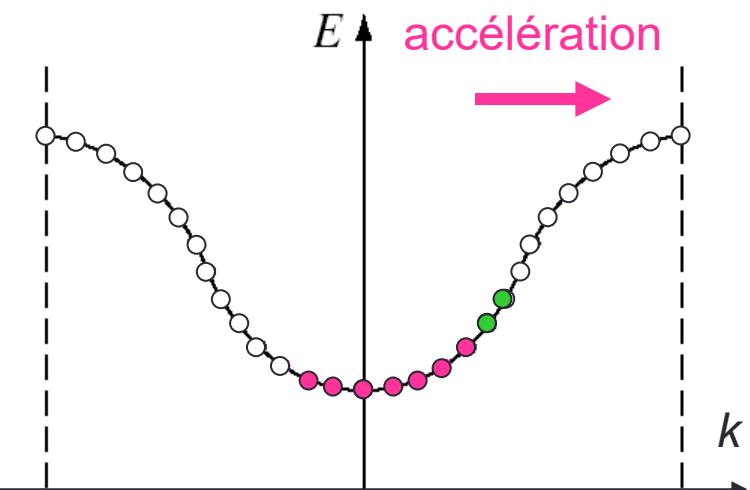
- Cristal parfait,  $\mathcal{E}_{elec} \neq 0$  et T uniforme.
  - À t=0, on applique  $\mathcal{E}_{elec}$
  - Un paquet d'ondes qui « avait » auparavant  $k_0$  subit une accélération

- À t>0,
$$\hbar \frac{dk_0}{dt} = -q \frac{\mathcal{E}_{elec}}{\hbar}$$

$$k'_0(t) = k_0 - q \frac{\mathcal{E}}{\hbar} t$$

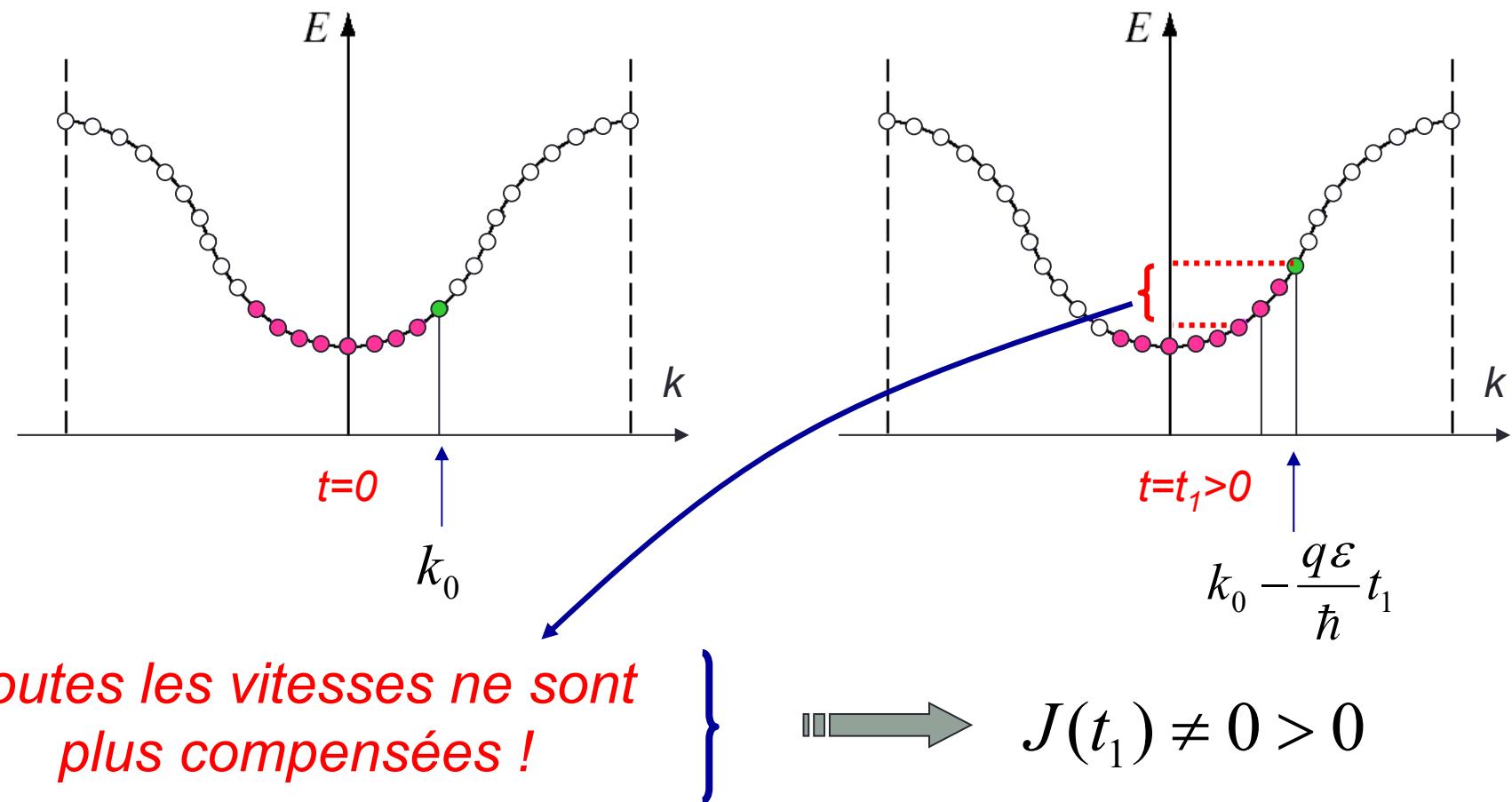
- Tous les électrons subissent la même variation  $\Delta k$

$$\Delta \overline{k}_0 = -q \times \frac{\mathcal{E}}{\hbar} \times t \quad \forall \overline{k}_0$$



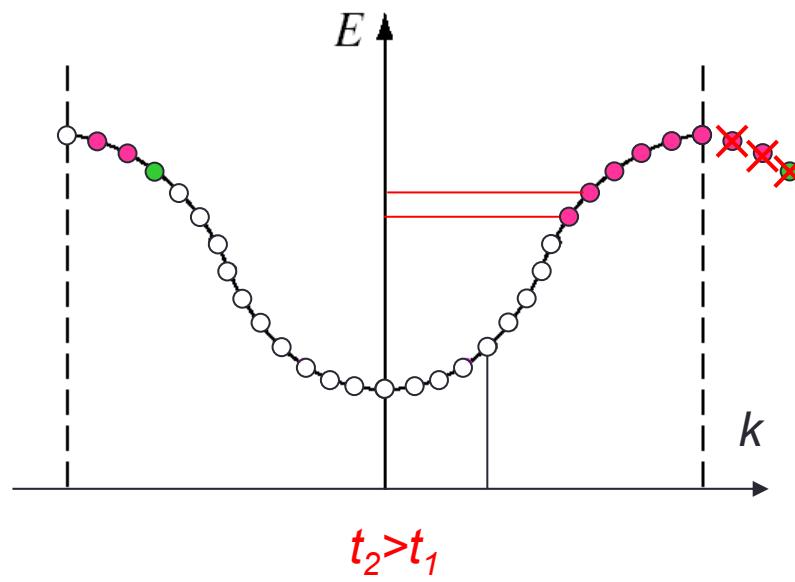
# Contribution à $J$ d'une bande incomplètement remplie

- Cristal parfait,  $\mathcal{E}_{elec} \neq 0$  et T uniforme.

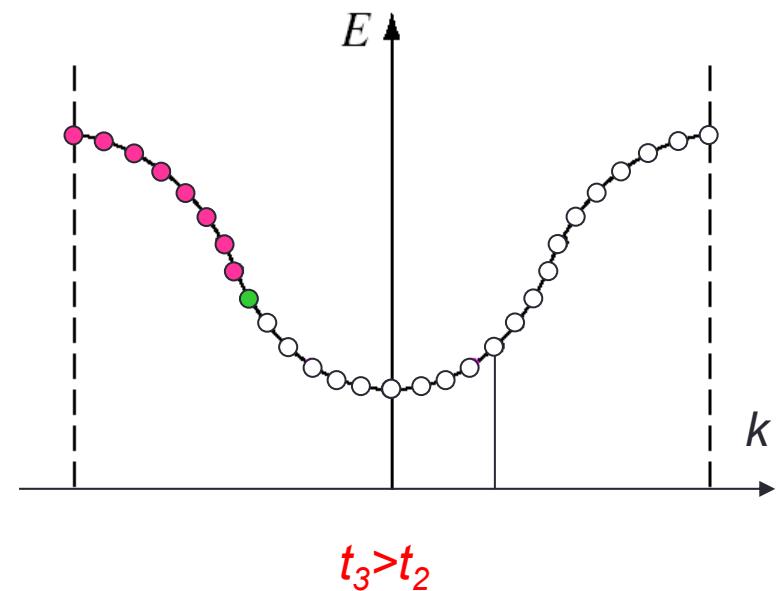


# Contribution à $J$ d'une bande incomplètement remplie

- Cristal parfait,  $\mathcal{E}_{elec} \neq 0$  et T uniforme.



$$J(t_2) \neq 0 > 0$$



$$J(t_3) \neq 0 < 0 \quad !!!$$

Bizarre ! Champ électrique constant et courant qui change alternativement de signe en fonction du temps !!

# Contribution à $J$ d'une bande incomplètement remplie

- Dans le cristal de Bloch-Brillouin, on prévoit que l'application d'un champ électrique continu  $\mathcal{E}_{\text{elec}}$  doit engendrer un courant électrique alternatif.
- La période de ce courant serait:

$$\hbar \frac{dk}{dt} = -q\varepsilon \quad \Rightarrow \quad \hbar \frac{2\pi}{a} \frac{1}{T} = -q\varepsilon$$

$$T = \frac{\hbar 2\pi / a}{q\varepsilon}$$

- Ce résultat n'est pas en cohérence avec les résultats expérimentaux !!!!
- Le cristal n'est pas aussi parfait que cela!!

# Le cristal réel de Bloch-Brillouin

- Cristal réel,  $\varepsilon_{elec} \neq 0$  et T uniforme.
  - Le cristal présente un certain nombre d'imperfections  
↔ grandes catégories:
    - Impuretés chimiques
    - Défauts ponctuels intrinsèques:
      - Lacunes
      - Interstitiels
      - Anti-sites
    - Défauts étendus
      - Macles
      - Dislocations
      - Clusters (groupe d'impuretés)
    - Vibration de la chaîne atomique autour de l'équilibre (phonons)

# Le cristal réel de Bloch-Brillouin

- Cristal réel: conséquence sur les porteurs de charge:
  - Le potentiel de B-B n'est plus exactement périodique:
    - B-B  $v_1(x) = v_1(x+a)$
    - Réel  $v(x) = v_1(x) + \Delta v(x)$
**Aléatoire!**
  - L'électron dans ce potentiel  $\Leftrightarrow$  soumis à une force ( $-\text{grad}v(x)$ )

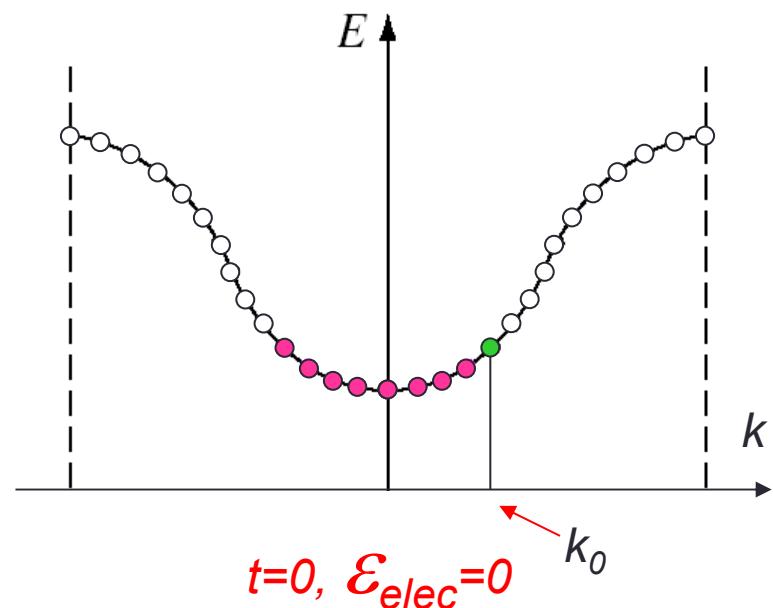
$$\hbar \frac{dk_0}{dt} = -q\varepsilon - \text{grad}(\Delta V(x)) = -q\varepsilon + \text{Force aléatoire}$$

- Cette force imprime des impulsions aléatoires (= à des forces lors des chocs avec les « impuretés »)
- En moyenne, tout les  $\tau$  (temps moyen entre deux chocs), l'électron change de direction et surtout perd son énergie cinétique  $\Leftrightarrow$  il acquiert donc en moyenne un « excédent » de vecteur d'onde:

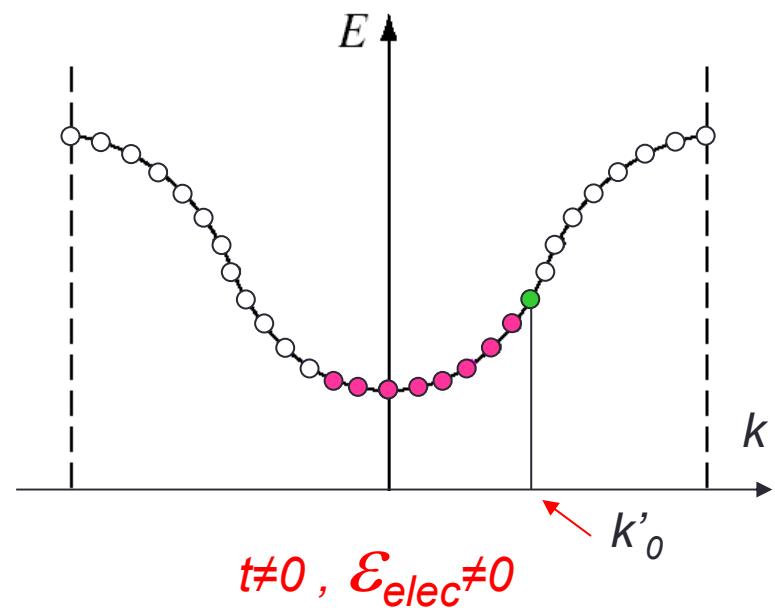
$$\dot{k}_0 = k_0 - q \frac{\varepsilon}{\hbar} \tau \quad \forall t$$

# Le cristal réel de Bloch-Brillouin

- Cristal réel,  $\mathcal{E}_{elec} \neq 0$  et T uniforme.

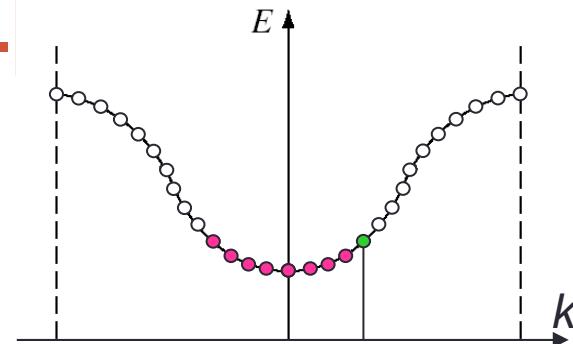


$$\dot{k}_0 = k_0 - q \frac{\epsilon}{\hbar} \tau \quad \underline{\forall t}$$



# Le cristal réel de Bloch-

- *Bandes presque vides:*
  - Énergie et vitesse de groupe:



- $\mathcal{E}=0$ :  $E_{k_0} = E_c + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_1^*}$        $v_g = \frac{1}{\hbar} \left( \frac{dE}{dk} \right)_{k_0} = \frac{\hbar}{m_1^*} k_0$        $k'_0 = k_0 - q \frac{\varepsilon}{\hbar} \tau$

$$\bar{j} = -q \sum_i \overline{v_{g_i}} = -q \frac{\hbar}{m_1^*} \sum_i k_i = 0$$

- $\mathcal{E} \neq 0$ :

$$\bar{j} = -q \sum_i \overline{v_{g_i}} = -q \frac{\hbar}{m_1^*} \sum_i k'_i = -q \frac{\hbar}{m_1^*} \sum_i k_i + q^2 \frac{\hbar}{m_1^*} \frac{\mathcal{E}_{elec} \tau}{\hbar} n$$

$$\bar{j} = q \mu_n n \mathcal{E}_{elec}$$

avec  $\mu_n = q \frac{\tau}{m_1^*} > 0$

$$\bar{j} = \sigma_n \mathcal{E}_{elec}$$

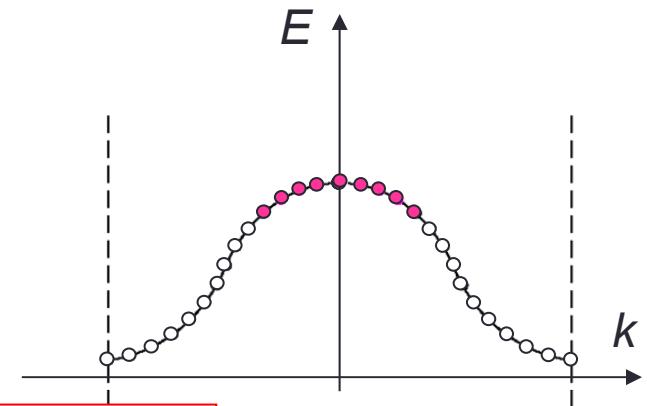
*Mobilité ( $\text{cm}^2/\text{Vs}$ )*

C'est la loi d'Ohm

# Le cristal réel de Bloch-Brillouin

- Bandes presque pleines:

- Astuce: pour calculer la contribution au courant d'une bande presque pleine, on « ajoute » les électrons manquant puis on les « enlève », ce qui va nous permettre d'introduire la notion de trous.
- N : nb de places ( $\sim$ nb d'atomes)
- N-p: nb d'électrons dans la bande
- p: nb de places vides ( de « trous » )



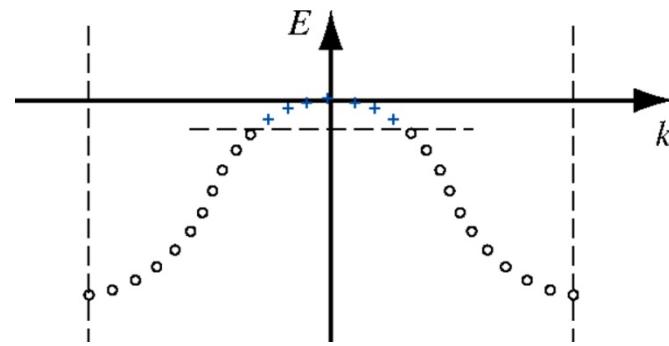
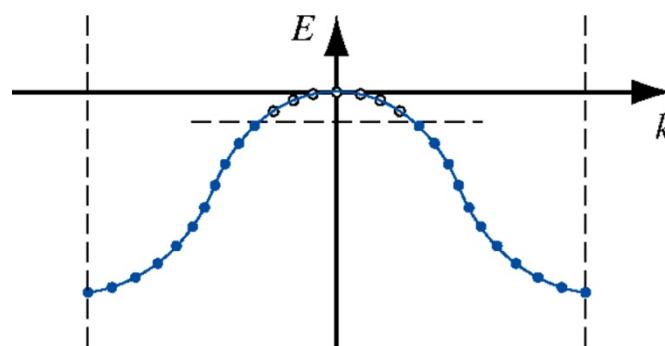
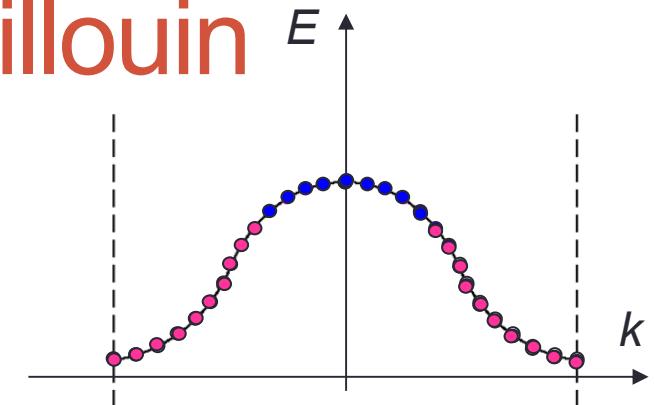
$$\begin{aligned}
 \bar{j} &= -q \sum_{i=1}^{N-p} v_{g_i} = -q \sum_{i=1}^N v_{g_i} - (-q \sum_{i=1}^p v_{g_i}) \\
 &= \underbrace{0}_{\text{bande pleine}} + q \sum_{i=1}^p v_{g_i}
 \end{aligned}$$

Charge positive!

# Le cristal réel de Bloch-Brillouin

- Bandes presque pleines:

- Règle: la contribution au courant d'une bande presque pleine est obtenue en supposant que les états vides sont effectivement occupés par des porteurs de charges positives  $+q$ : des trous. Il suffit de sommer sur le nombre total de trous
- Trous: paquet d'ondes de charges positives



# Notion de trous

- Expression de  $J$ :
- Nota: pour « arracher » 1  $e^-$  en (a) il faut plus d'énergie qu'en (b)  $\Leftrightarrow$  un trou en (a) est plus énergétique qu'en (b).

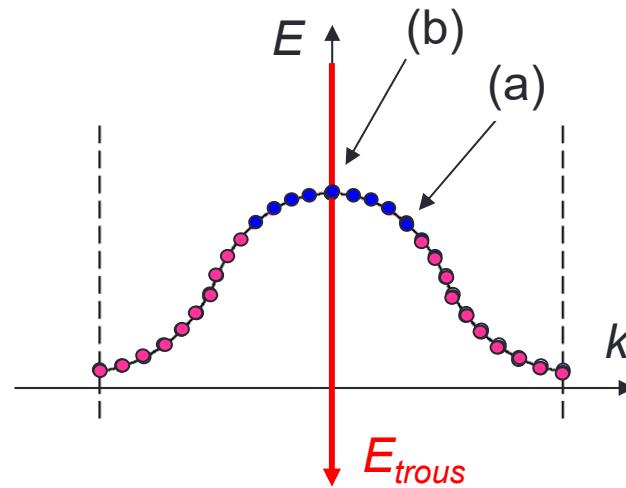
$$\bullet E(e^-) = -E(h^+) \Leftrightarrow E_{trous} = -E_V + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \Rightarrow v_g^{trous} = \frac{\hbar k_0}{m^*}$$

$$\bullet \varepsilon_{elec} = 0 \Leftrightarrow J = q \left[ \frac{\hbar}{m^*} \sum \overline{k_0} \right] = 0$$

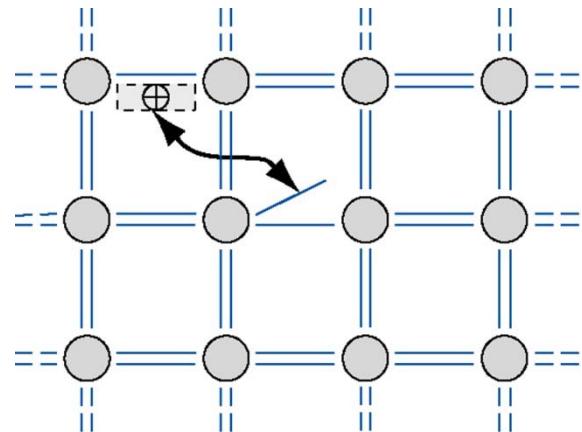
$$\bullet \varepsilon_{elec} \neq 0 \Leftrightarrow J = q \left[ \frac{\hbar}{m_2^*} \sum_{i=1}^p \left( \overline{k_0} + q \frac{\varepsilon_{elec} \tau}{\hbar} \right) \right] = \frac{q^2 \hbar}{m_2^*} \frac{\varepsilon_{elec}}{\hbar} \tau \times p$$



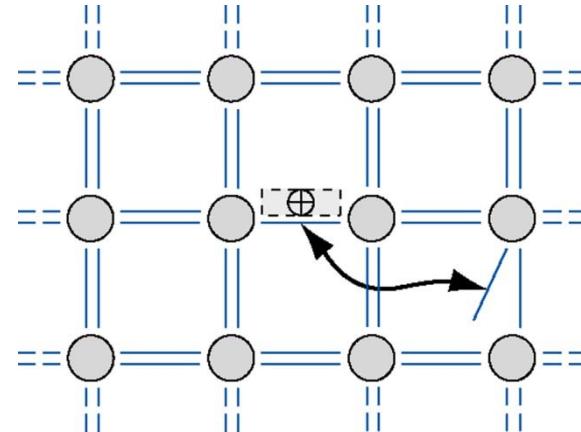
$$J = q \times p \times \mu_p \times \varepsilon_{elec} \quad \text{avec} \quad \mu_p = \frac{q \tau}{m_2^*}$$



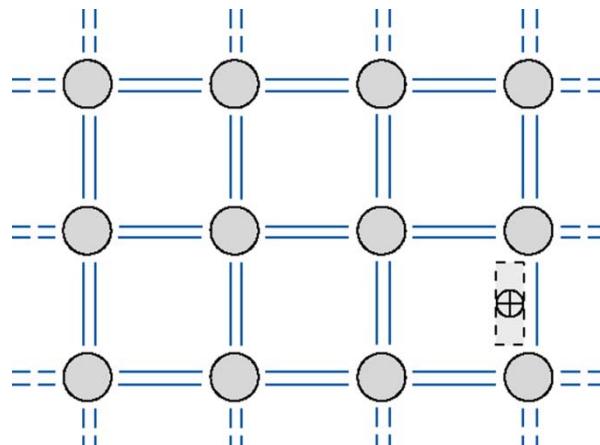
# Notion de trous: conduction



(a)



(b)



(c)

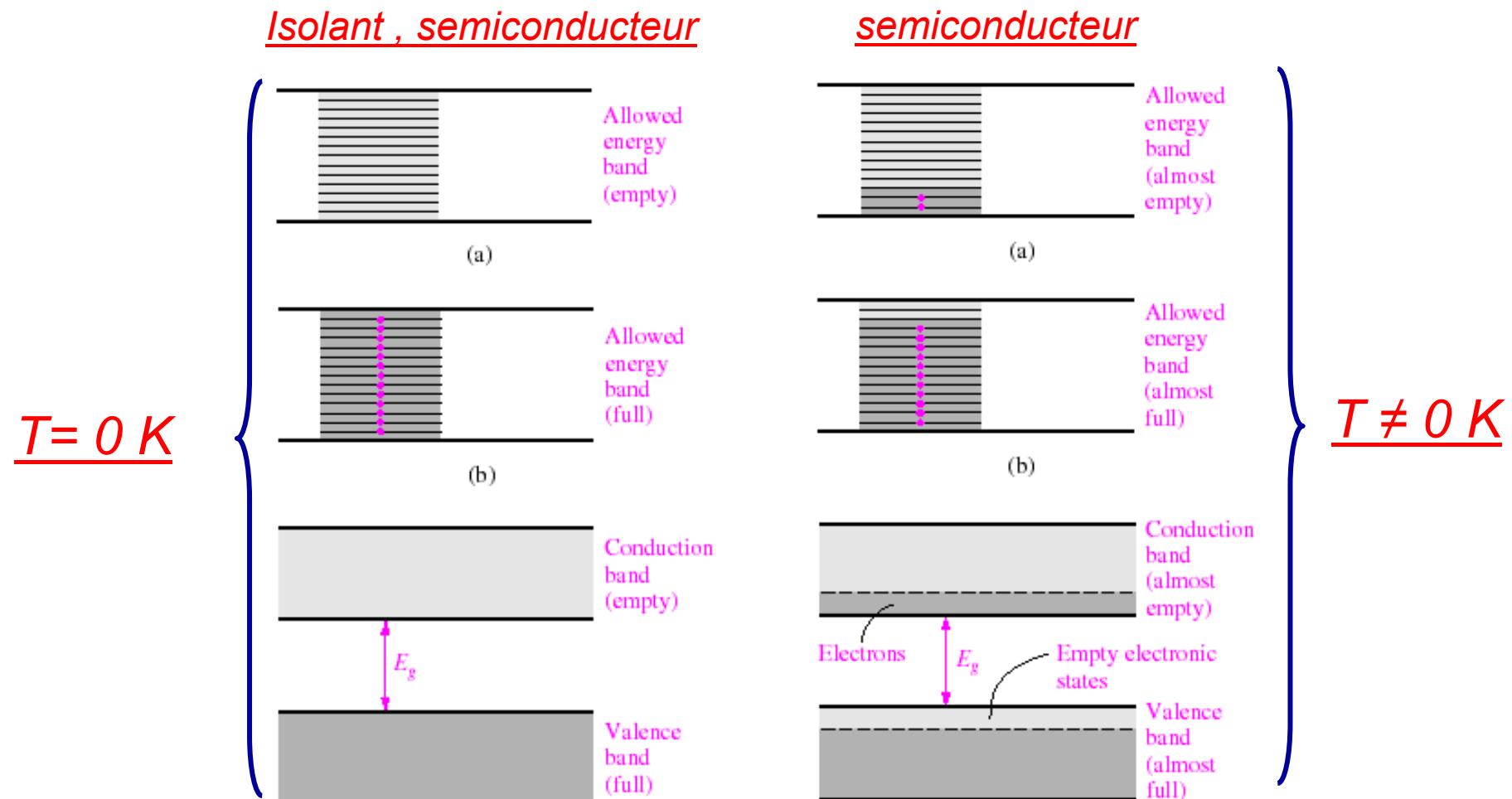
# Conduction par électrons et trous

- Cas fréquent dans les semiconducteurs:
  - En pratique, dans les semiconducteurs, il existe une bande presque vide que l'on appelle bande de conduction (**BC**) au dessus d'une bande presque pleine que l'on appelle bande de valence (**BV**). Elles sont séparées par une bande interdite ( « bandgap ou gap »).

$$\overline{J} = \underbrace{qn\mu_n\varepsilon}_{BC} + \underbrace{qp\mu_p\varepsilon}_{BV} = \sigma\varepsilon$$

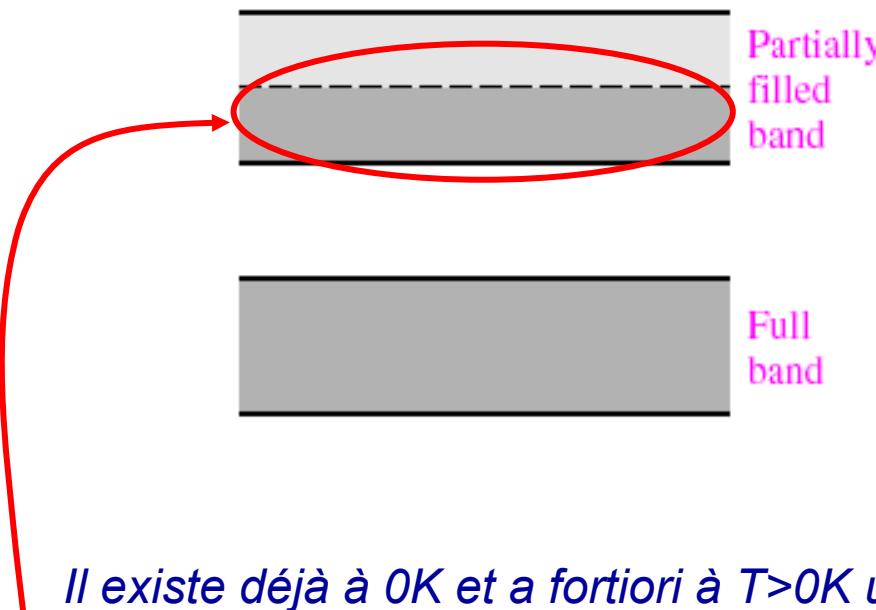
# Semiconducteur ou isolant ?

- Comment les différentie on?



# Métal ?

- T=0K ou T $\neq$  0K



# Résumé:

- Métal:
  - Très faible résistivité
  - Conduit mieux le courant à basse température
- Isolant:
  - Ne conduit pas le courant même à haute température
  - « gap » supérieur à 3,5 eV (valeur généralement admise)
- Semiconducteur:
  - « gap » inférieur à 3,5 eV ( la tendance est à l'augmentation de ce critère!)
  - Sa conductivité est une fonction **non monotone** de la température

# CHAPITRE 8

---

Mécanique statistique : la fonction de  
Fermi – Dirac et la fonction de  
Maxwell – Boltzmann

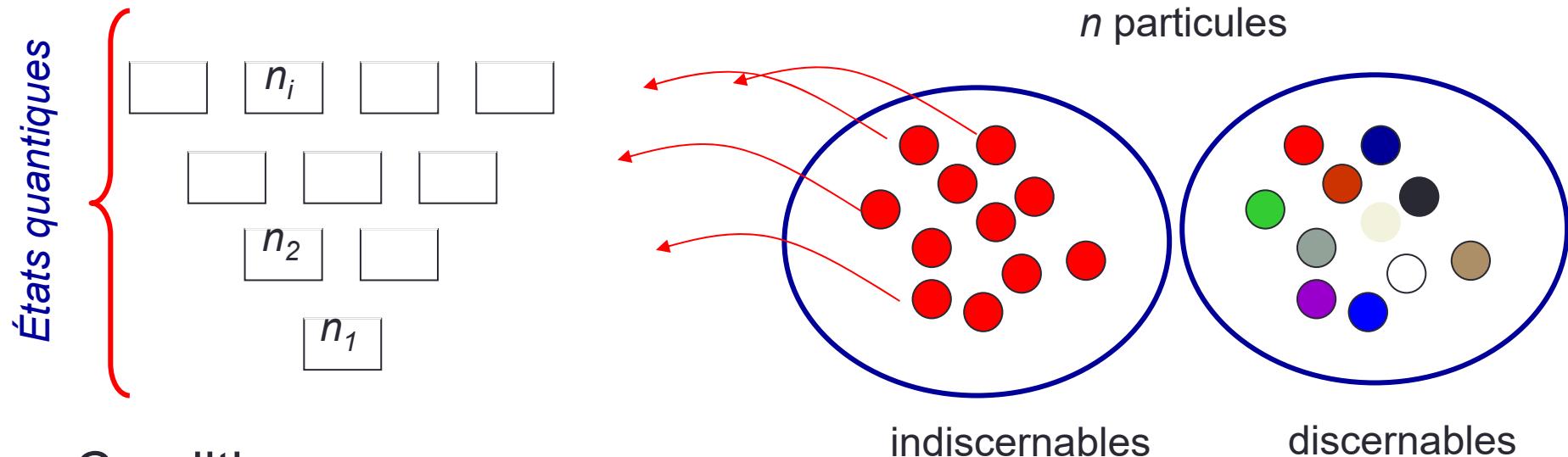
# Les différentes statistiques

- Statistique de Maxwell – Boltzmann
  - Particule discernable
    - Molécules de gaz dans une enceinte basse pression
- Statistique de Bose – Einstein
  - Particule indiscernable
  - Plusieurs particules sur un même état quantique
    - Photons, Phonons
- Statistique de Fermi – Dirac
  - Particule indiscernable
  - 1 seule particule sur un même état quantique (principe d'exclusion de Pauli)
    - Électrons dans les solides

*Les particules n'interagissent pas entre elles*

# Les différentes statistiques

- Méthodes de résolution:



- Conditions :
  - Nb de particules est constant
  - Énergie interne constante
  - Discernables ou indiscernables?
  - 1 ou plusieurs par état quantique ?

$$\therefore \sum_i n_i = n$$

$$\therefore \sum_i n_i E_i = E$$

# Maxwell – Boltzmann

- Discernables
  - Chaque état peut contenir grand nombre de particules
  - L'état d'équilibre est celui le plus probable
- 

- Soit un état d'équilibre avec  $n_1$  particules dans  $c_1$ ,  $n_2$  dans  $c_2$ , ...,  $n_i$  dans  $c_i$ .
- Quelle est la probabilité d'obtenir cette configuration?

$$P = \frac{n!}{n_1! n_2! \dots n_i! \dots} = \frac{n!}{\prod_i n_i!}$$

- Cette configuration est celle d'équilibre si  $P$  ou  $\ln(P)$  est maximum  $\Leftrightarrow d(\ln P) = 0$
- On obtient (voir par ex. Mathieu)

Probabilité que  
la particule soit  
sur le niveau  $E_i$

$$f(E_i) = \frac{n_i}{g_i} = e^{-(E_i - E_F)/kT}$$

$n_i$ : nb de particules sur  $E_i$   
 $g_i$ : nb de places (états) sur  $E_i$

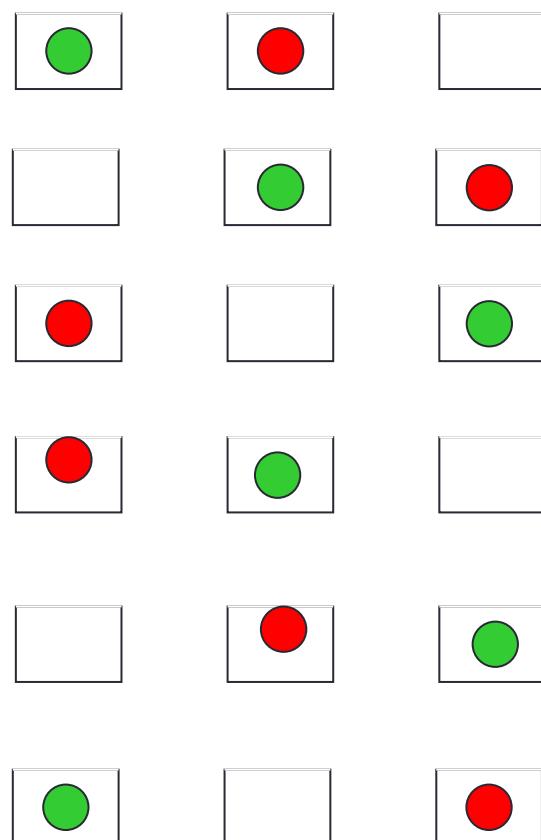
# Statistique de Fermi – Dirac

- Niveau de Fermi: ce niveau  $E_F$  représente la variation de l'énergie libre du système en fonction du nombre de particules. On appelle également cette quantité le potentiel chimique
- l'énergie libre d'un système représente le travail maximal que ce système peut fournir à l'extérieur

# Différence discernable ou non

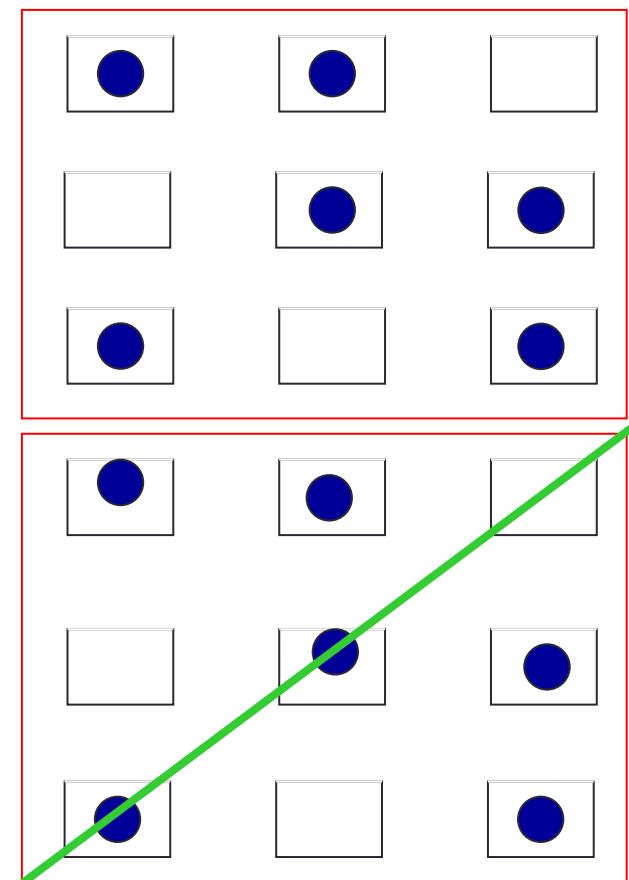
(1 « bille » par case  $\Leftrightarrow$  Pauli)

*Discernable*



$$\frac{g_i!}{(g_i - N_i)!}$$

*Indiscernable*

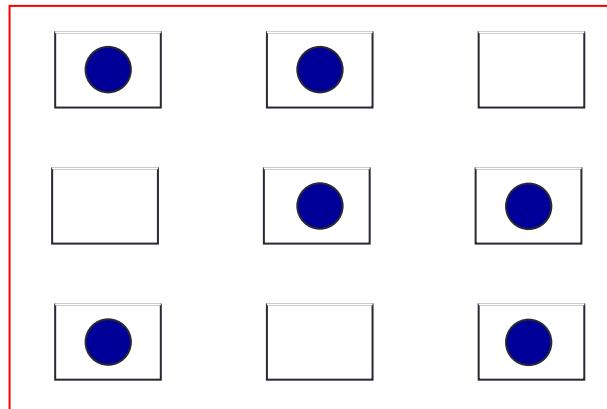


$$\frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!}$$

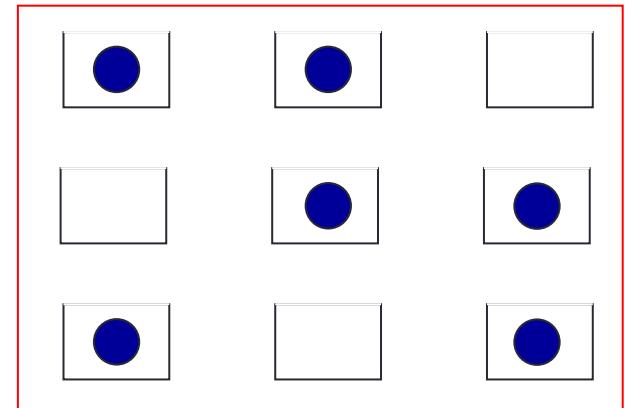
$N_i$ : nb de particules sur  $E_i$   
 $g_i$ : nb de places (états) sur  $E_i$

# indiscernables

« Bose »



« Pauli »



$$\frac{(N_i + g_i - 1)!}{(g_i - 1)! N_i!}$$

$$\frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!}$$

$N_i$ : nb de particules sur  $E_i$

$g_i$  : nb de places (états) sur  $E_i$

# Statistique de Fermi – Dirac

- Même démarche que précédemment

$\xrightarrow{\hspace{1cm}} E_i \xleftarrow{\hspace{1cm}} \frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!}$

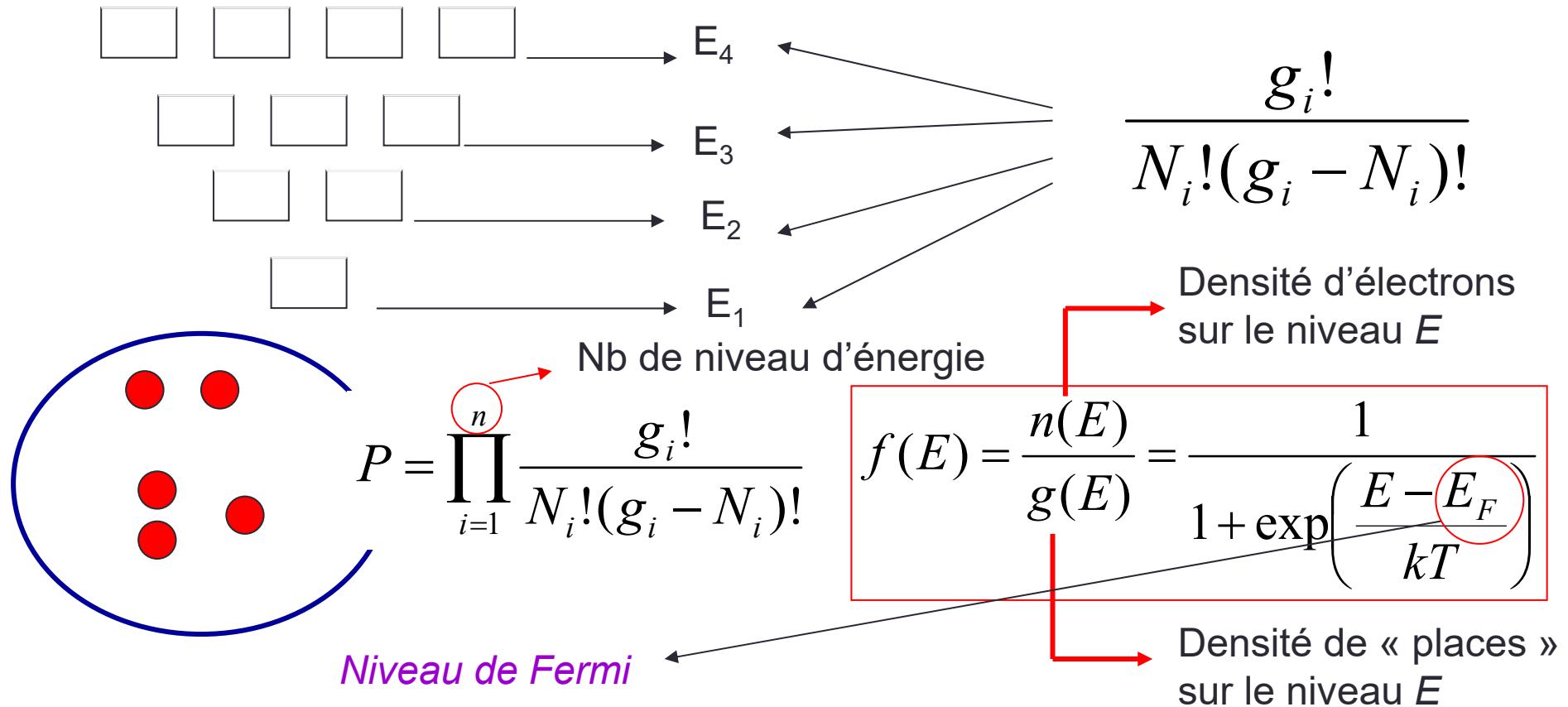
- Niveau d'énergie  $E_i$ ,  $g_i$  fois dégénéré ( $g_i$  « boites » ou cellules état quantiques de même énergie  $E_i$ ) et  $N_i$  particules à distribuer.
- Si maintenant , on a plusieurs ( $n$ ) niveau d'énergie, le résultat est le produit de toutes les distributions

Nb de niveau d'énergie

$$P = \prod_{i=1}^n \frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!}$$

# Statistique de Fermi – Dirac

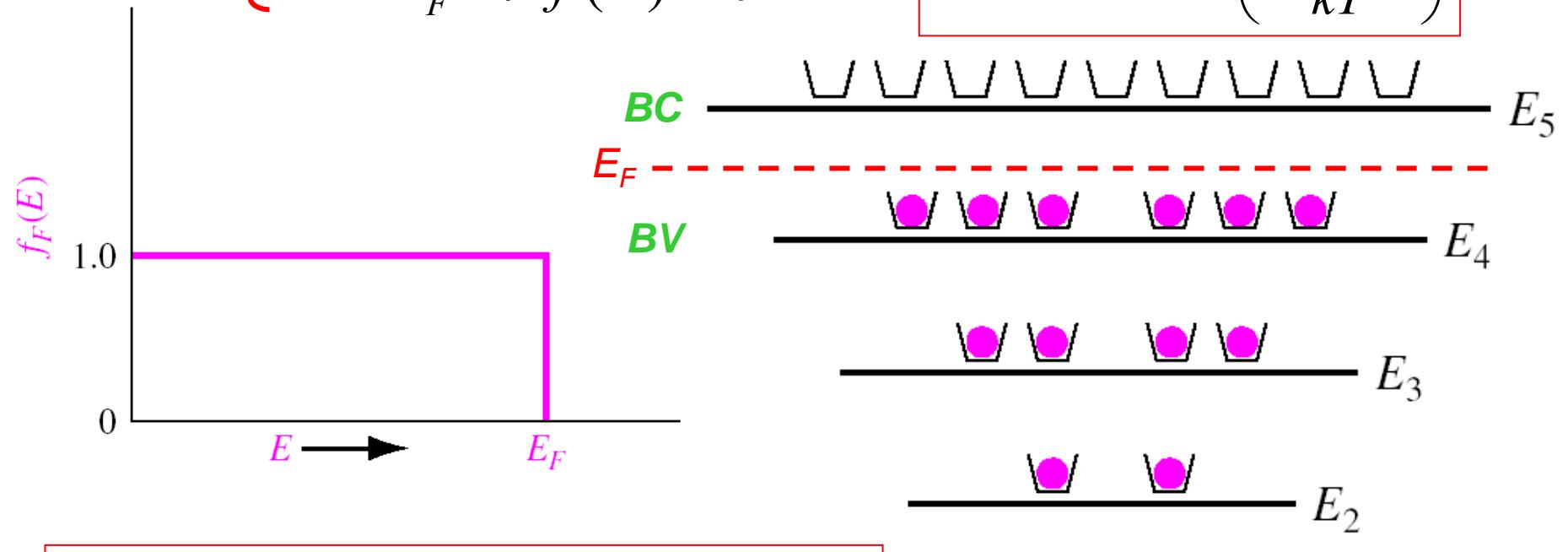
- Même démarche que précédemment



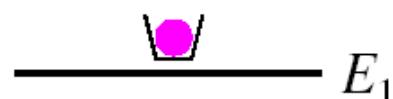
# Fonction de Fermi – Dirac

À T= 0K:  $\begin{cases} E < E_F \Rightarrow f(E) = 1 \\ E > E_F \Rightarrow f(E) = 0 \end{cases}$

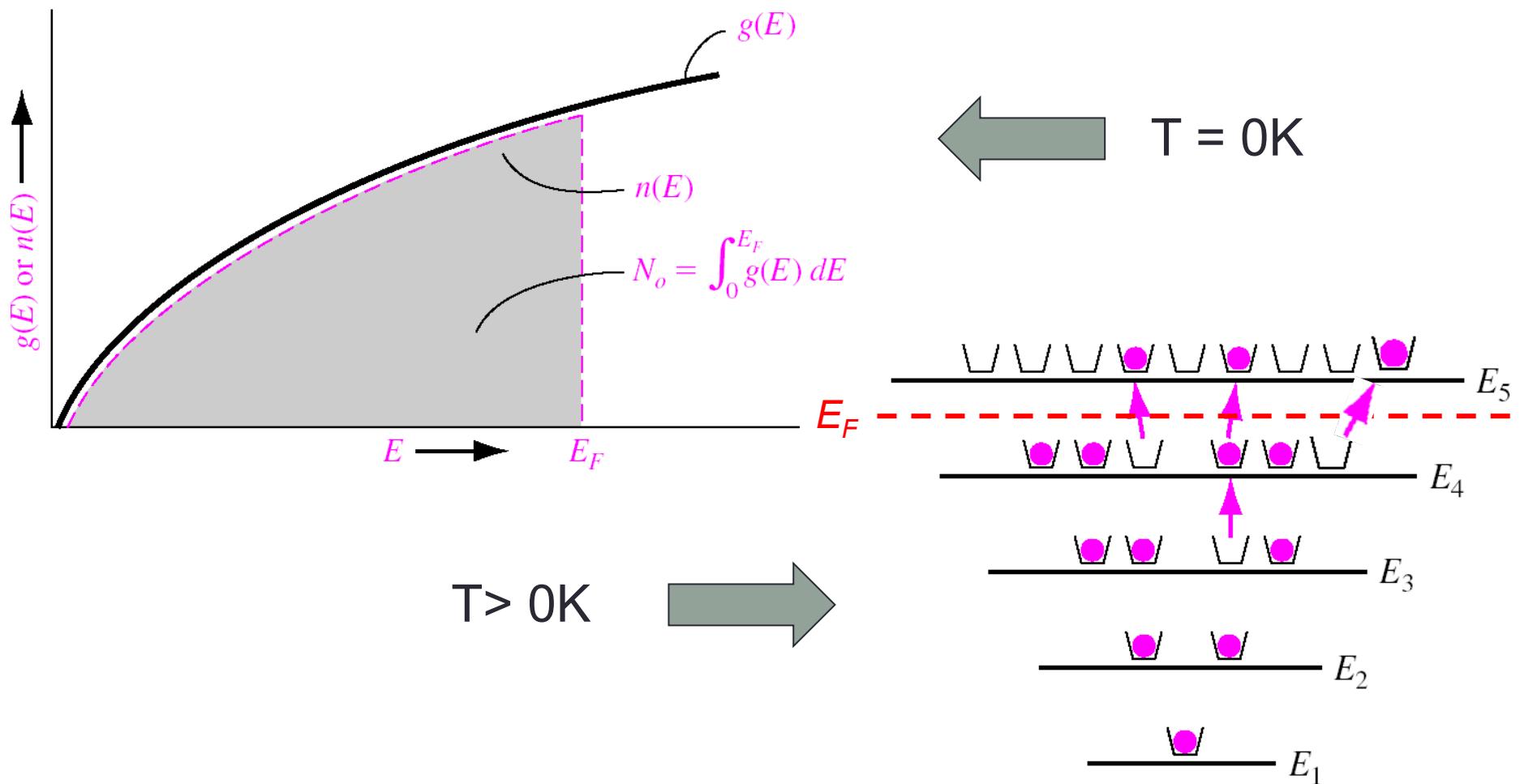
$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)}$$



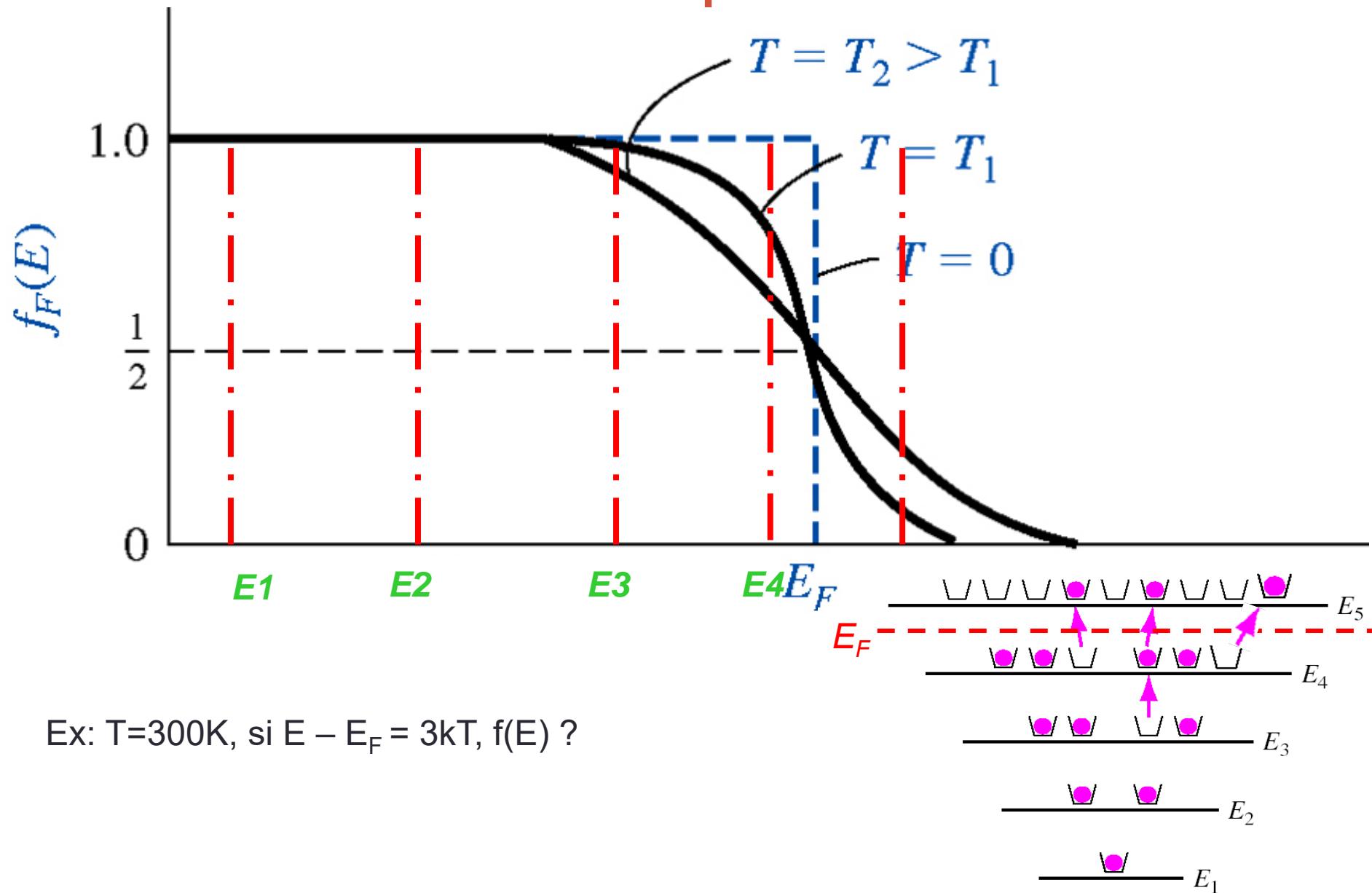
$$f_F(E = E_F) = \frac{1}{1 + \exp(0)} = \frac{1}{1 + 1} = \frac{1}{2}$$



# Fonction de Fermi – Dirac

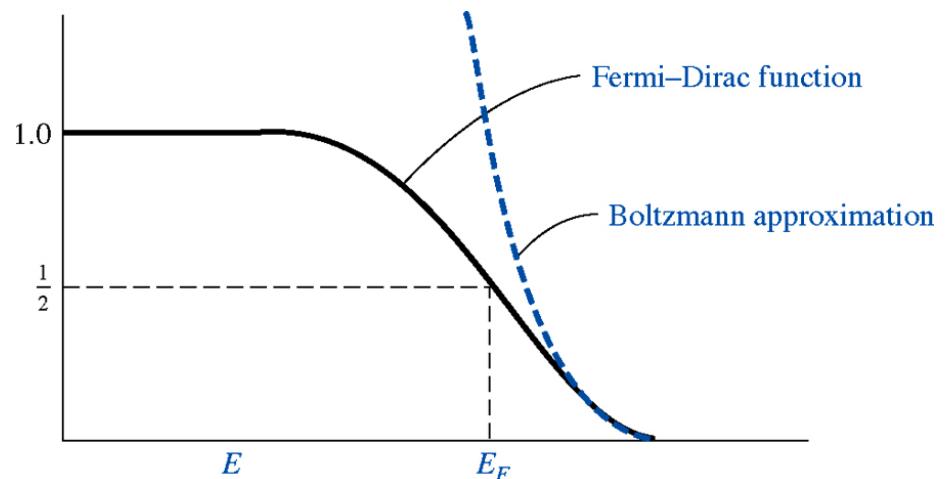


# Influence de la température



# Passage FD $\leftrightarrow$ MB ?

- L'utilisation de FD pour les calculs n'est pas tjs aisée
- Dans quelle mesure MB est suffisant ?
  - Condition:

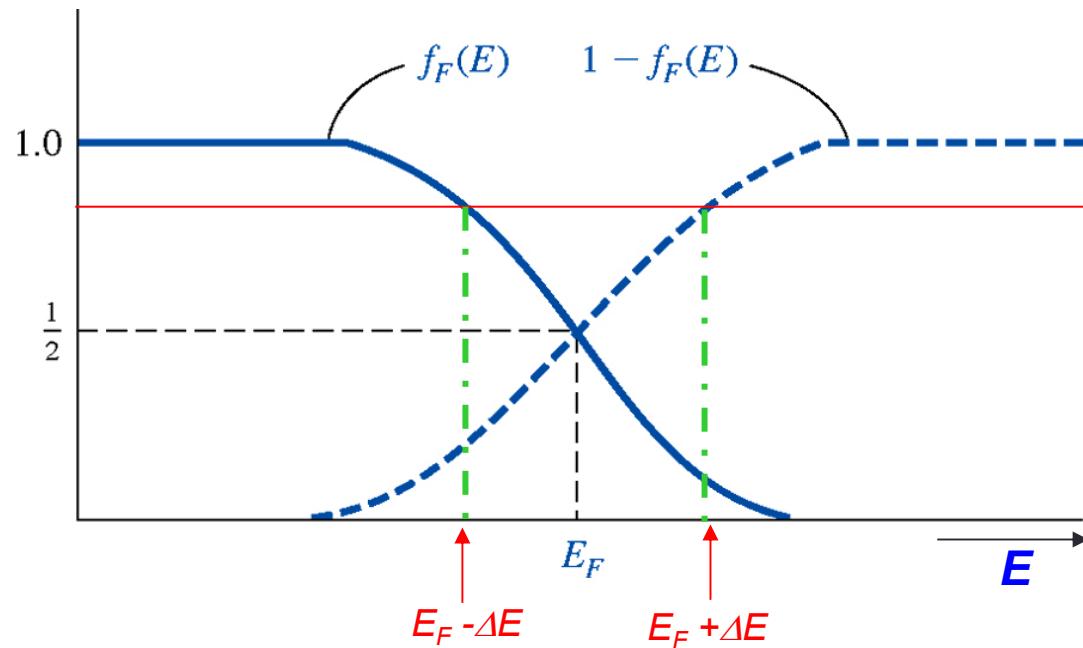


$$E - E_F \gg kT \quad \rightarrow \quad f_F(E) \approx \exp \left[ \frac{-(E - E_F)}{kT} \right]$$

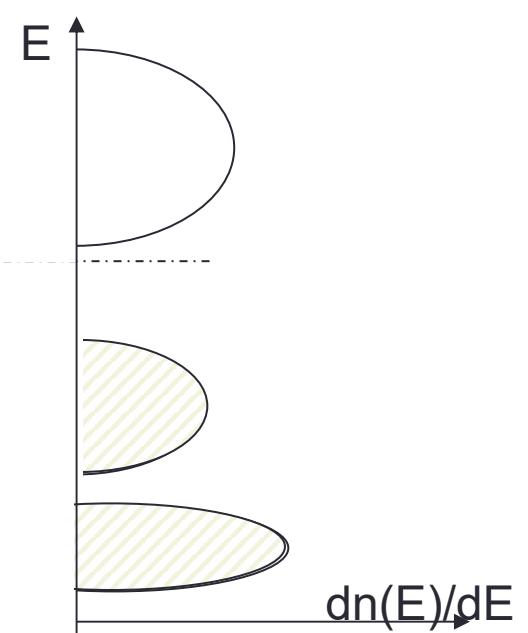
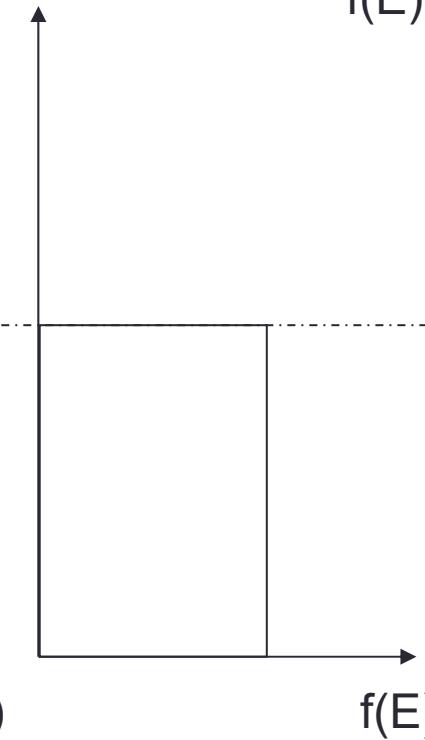
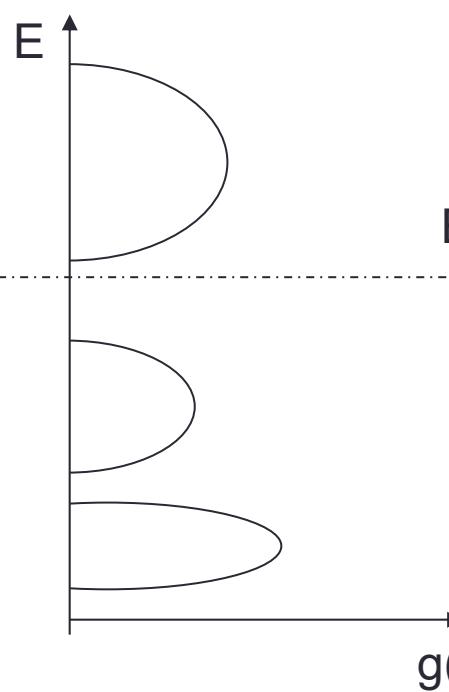
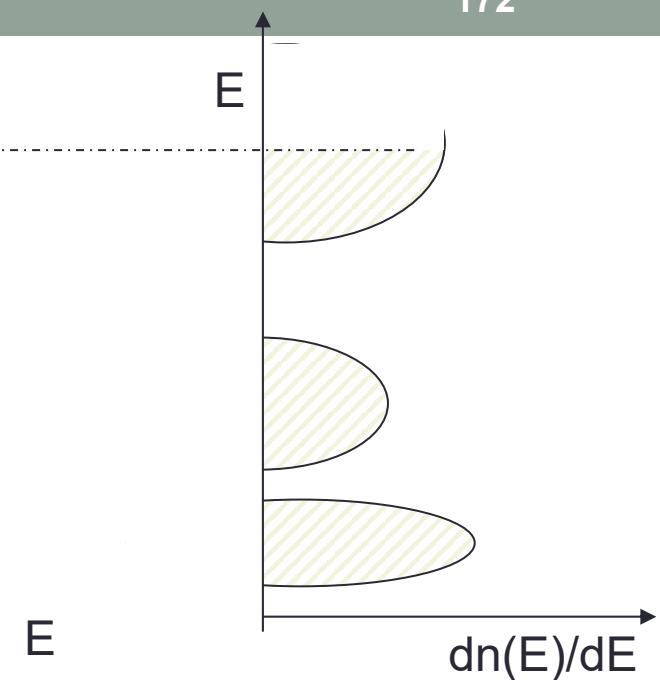
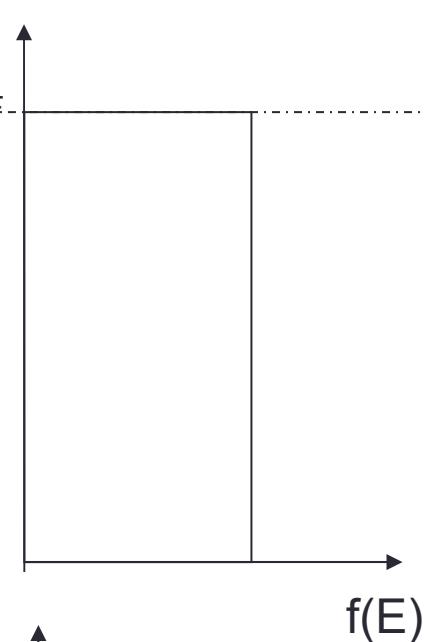
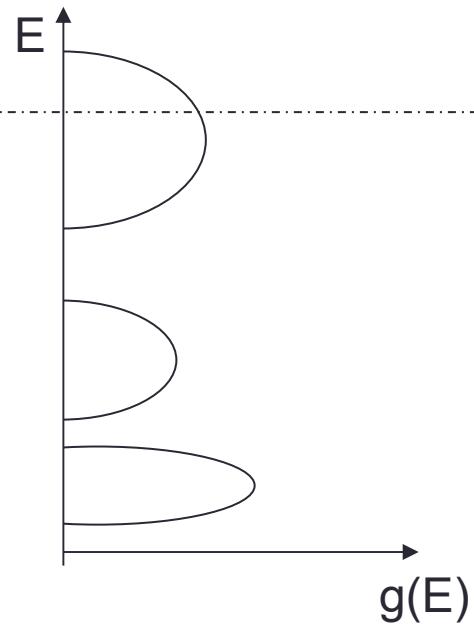
Si  $E - E_F > 3 kT$ , erreur est de 5%

- Règle: on confondra la statistique de Fermi – Dirac et la statistique de Maxwell – Boltzmann pour tous les niveaux d'énergie  $E$  tels que  $|E - E_F| > 3kT$ . À  $T$  ambiante,  $kT=25$  meV  $\Leftrightarrow |E - E_F| > 75$  meV.

# Passage FD $\leftrightarrow$ MB



Pour  $E < E_F$ , il est facile de montrer que la probabilité de non occupation  $1-f(E)$  est la même à  $E_F - \Delta E$  que la probabilité d'occupation  $f(E)$  à  $E_F + \Delta E$ . Le point  $f(E) = 0,5$  est le centre de symétrie pour la courbe.



# CHAPITRE 10

---

Le semiconducteur à l'équilibre  
thermodynamique

# Le semiconducteur à l'équilibre

- C'est quoi l'équilibre?
  - Pas de forces extérieures:
    - Pas de tension appliquée
    - Pas de champ magnétique
    - Pas de gradient de température

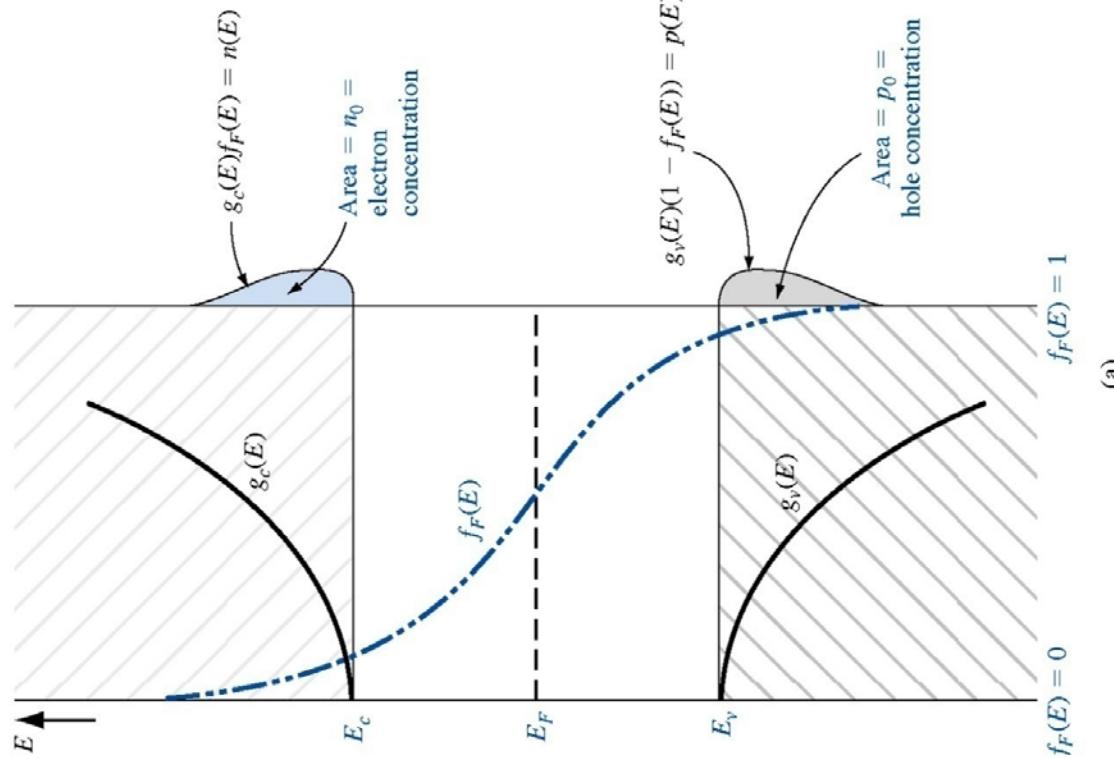
# Densité de porteurs de charges dans les SC.

- Question: combien y a t il d'électrons dans la BC et de trous dans la BV dans un semiconducteur à une température T?
- Réponse : (voir chap 9!)
  - À une énergie E:  $n(E) = g_c(E)f(E)$
  - $p(E) = g_v(E)(1 - f(E))$
  - Dans la bande de largeur  $\Delta E$

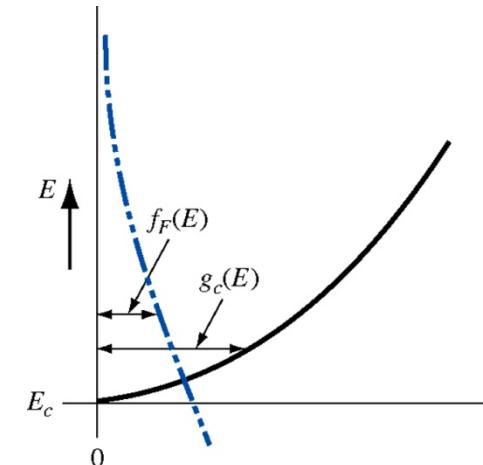
$$n_0 = \int_{E_c \text{ min}}^{E_c \text{ max}} g_c(E)f(E)dE$$

$$p_0 = \int_{E_v \text{ min}}^{E_v \text{ max}} g_v(E)(1 - f(E))dE$$

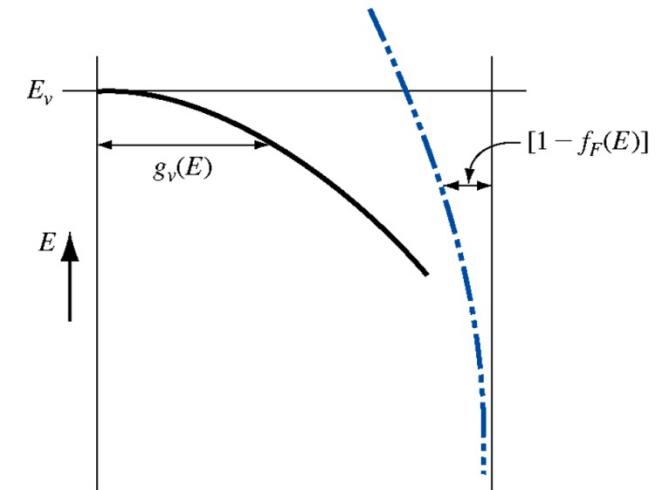
# Densité de porteurs de charges dans les SC.



(a)



(b)



(c)

# Calcul de $n_0$ et $p_0$

- hypothèse:  $E_F$  est à plus de  $3kT$  sous la BC ou à plus de  $3kT$  au dessus de BV  $\Leftrightarrow$  on peut utiliser l'approximation de MB.
  - *Expression de  $n_0$ :*

$$n_0 = \int_{E_c \min}^{E_c \max} g_c(E) f(E) dE = \int_{E_c \min}^{+\infty} \frac{4\pi(2m_n^*)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E - E_C} \times e^{-\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} dE$$

$$n_0 = N_C \exp\left[\frac{-(E_c - E_F)}{kT}\right] \text{ avec } N_C = 2\left(\frac{2\pi m_n^* k T}{h^2}\right)^{3/2}$$

# Calcul de $n_0$ et $p_0$

$$n_0 = N_C \exp\left[-\frac{(E_c - E_F)}{kT}\right] \text{ avec } N_C = 2\left(\frac{2\pi m_n^* kT}{h^2}\right)^{3/2}$$

$$p_0 = N_V \exp\left[-\frac{(E_F - E_v)}{kT}\right] \text{ avec } N_V = 2\left(\frac{2\pi m_p^* kT}{h^2}\right)^{3/2}$$

$N_c$  et  $N_v$  sont les **densité d'états effectives** ( $\sim$  le nombre de places) dans la bande de conduction et la bande de valence respectivement. L'ordre de grandeur est  $N_c \sim N_v \sim 2.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ .

## La loi d'action de masse

- Règle pratique: le produit du nombre d'électrons dans la BC par le nombre de trous dans la BV est donné par:

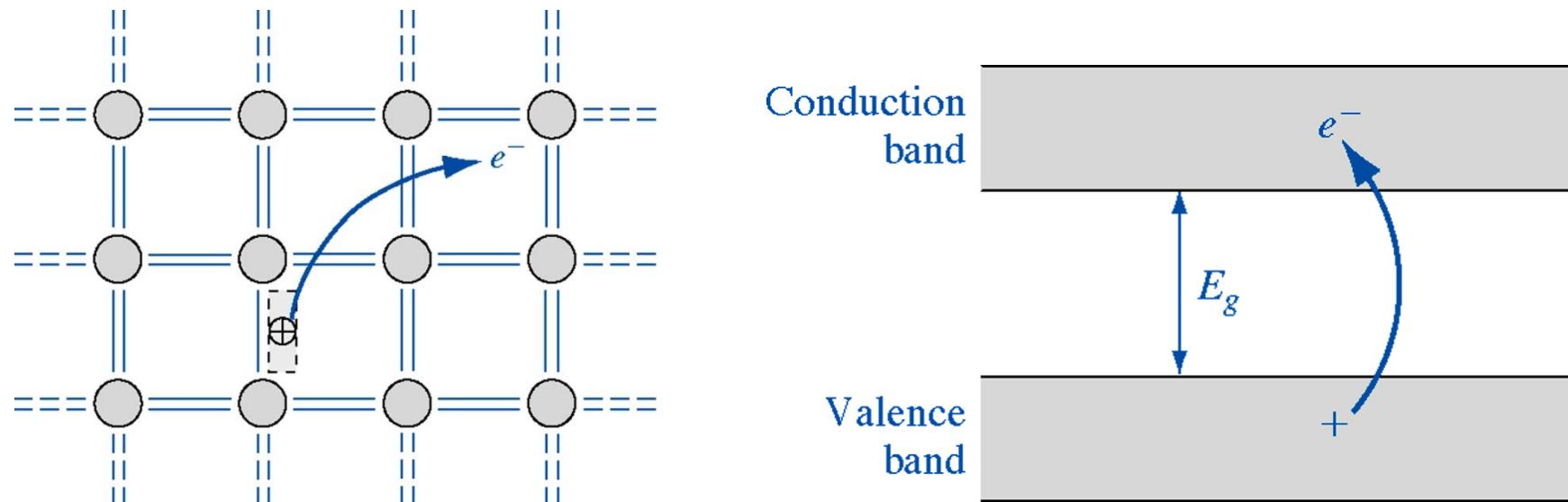
$$n \times p = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_c - E_v}{kT}\right) = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right) = n_i^2$$

- Remarque importante: les expressions que nous venons d'établir pour  $n$  et  $p$  l'ont été en supposant que  $E_F$  distant d'au moins  $3kT$  d'une ou l'autre bande. Ce calcul ne suppose pas que  $n = p \Leftrightarrow$  la règle  $n \times p = n_i^2$  restera vraie lorsque l'on dopera le SC, à condition de respecter la condition sur  $E_F$ . C'est le cas usuel. Dans le cas contraire (exception) on dit que le SC est dégénéré.

# Niveau de Fermi dans un semiconducteur intrinsèque

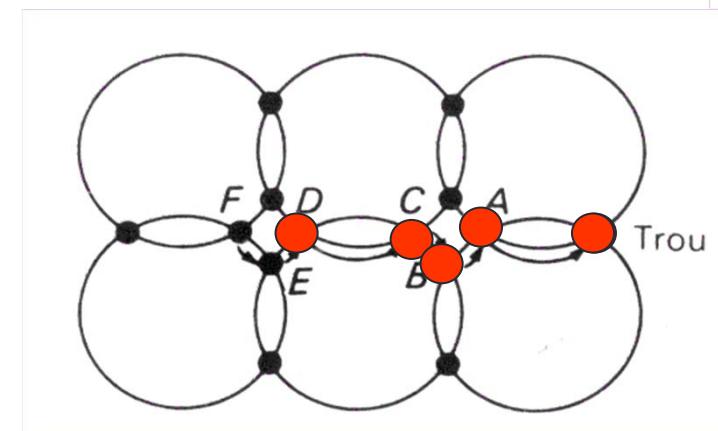
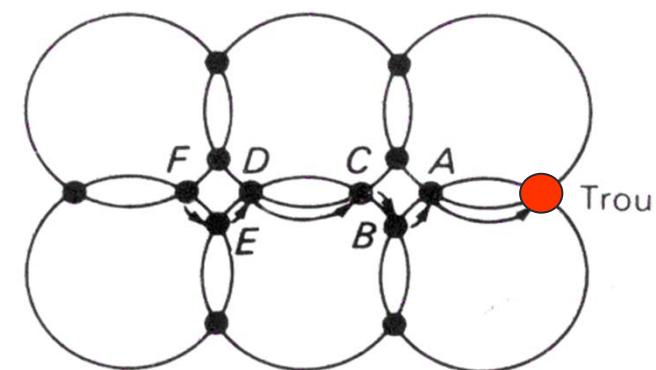
- Semiconducteur intrinsèque : semiconducteur sans impuretés , *i.e* que les niveaux d'énergie permis sont seulement ceux des bandes.
- Les électrons  $n$  dans la BC proviennent de la BV; ils laissent des trous  $p$  dans la BV

$$\Rightarrow n = p = n_i \quad \forall T$$



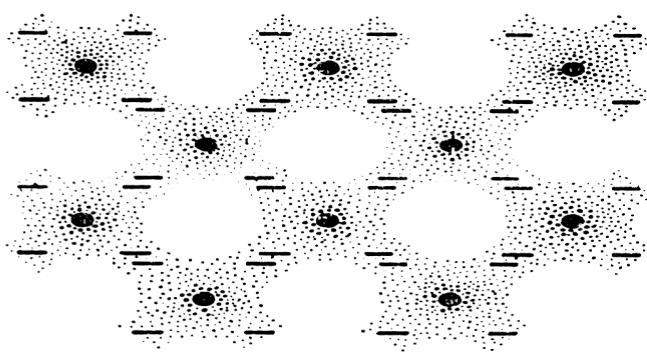
# Conduction bipolaire

- La présence d'électrons et trous entraîne une conduction bipolaire dans les SC
- On peut privilégier une des deux conductions par le dopage du semi-conducteur, *ie* l'introduction d'impuretés

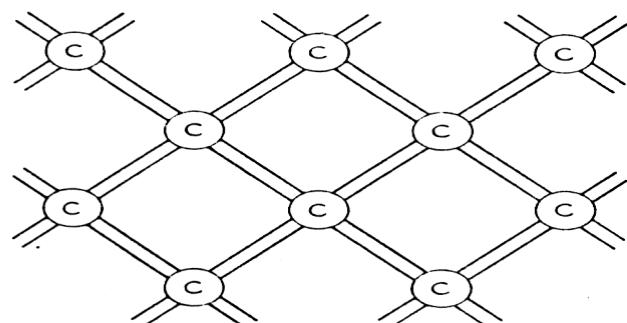


$E_{\text{externe}}$

## Électrons dans une structure Diamant (ex: Si)



(a) ELECTRON PAIR BONDS



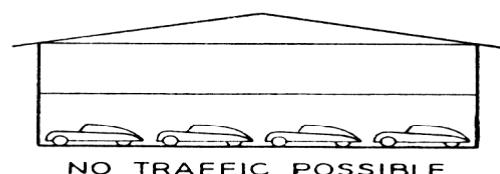
(c) PLANE DIAGRAM OF DIAMOND LATTICE WITH BONDS REPRESENTED BY LINES



POSITIVE CHARGE  
+4 IN CORE OF  
CARBON ATOM

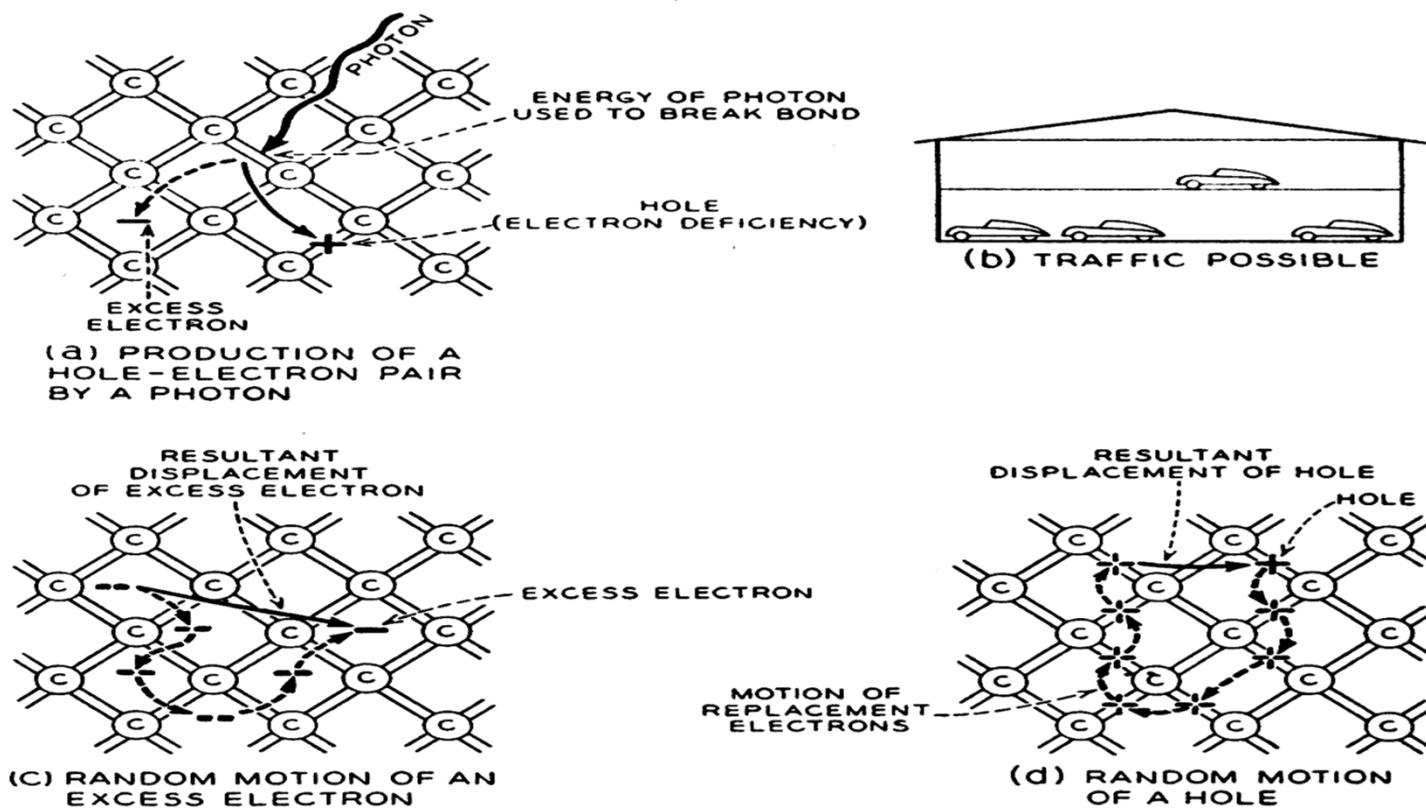
VALENCE  
ELECTRONS

(b)



FOUR  
VALENCE BONDS

# Électrons dans une structure Diamant (ex: Si)



# Niveau de Fermi dans un semiconducteur intrinsèque

- Postulat:  $n = p$

$$n_0 = N_C \exp\left[\frac{-(E_c - E_{F_i})}{kT}\right] = p_0 = N_V \exp\left[\frac{-(E_{F_i} - E_v)}{kT}\right]$$



$$\exp\left[\frac{2E_{F_i}}{kT}\right] = \frac{N_C}{N_V} \exp\left[\frac{(E_c + E_v)}{kT}\right]$$



$$E_{F_i} = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{1}{2} kT \ln \frac{N_V}{N_C} = \frac{E_c + E_v}{2} + \underbrace{\frac{3}{4} kT \ln \frac{m_v^*}{m_c^*}}_{\sim 10 \text{ meV}} \approx \frac{E_c + E_v}{2} = E_{F_i}$$

$\sim 10 \text{ meV}$

# Niveau de Fermi dans un semiconducteur intrinsèque

- Quelques valeurs numériques

	$m_c^*/m_0$	$m_v^*/m_0$	$N_C$ ( $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ )	$N_V$ ( $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ )	$Eg$ (eV)	$n_i$ ( $\text{cm}^{-3}$ ) à 300K
Si	1,06	0,59	2,7	1,1	1,12	$1,5 \times 10^{10}$
Ge	0,55	0,36	1	0,5	0,66	$2,4 \times 10^{13}$
GaAs	0,067	0,64	0,04	1,3	1,43	$\sim 1 \times 10^6$
GaN	0,2	1,4	0,223	4,6	3,39	$\sim 10^{-11}$
4H-SiC			1,69	2,49	2,86	
InP	0,073	0,87	0,05	2	1,27	