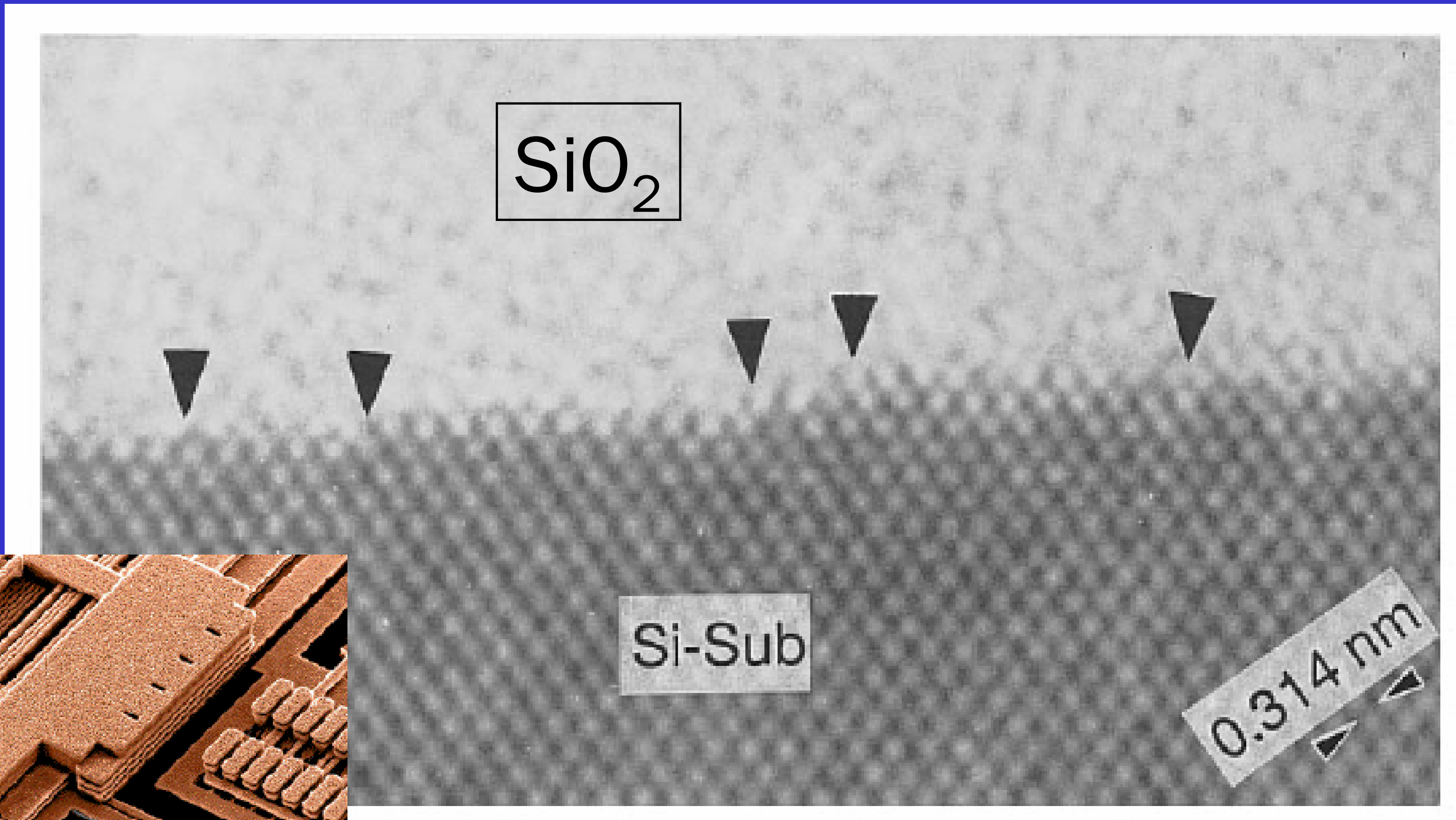
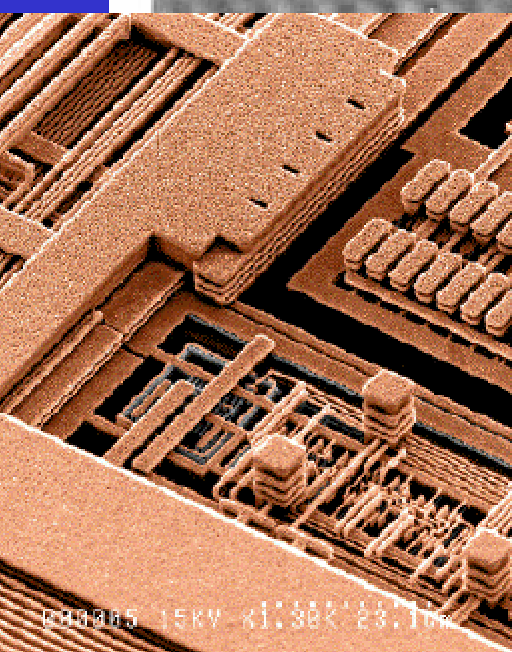
PHYSIQUE DE LA MATIÈRE CONDENSÉE

PLAN DU COURS

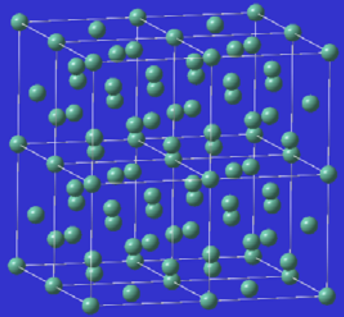
Si/SiO_2 interface (MOSFET technology)

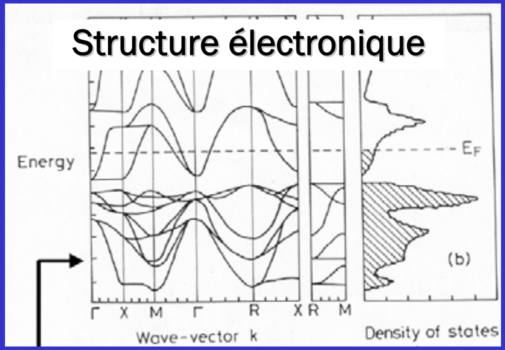


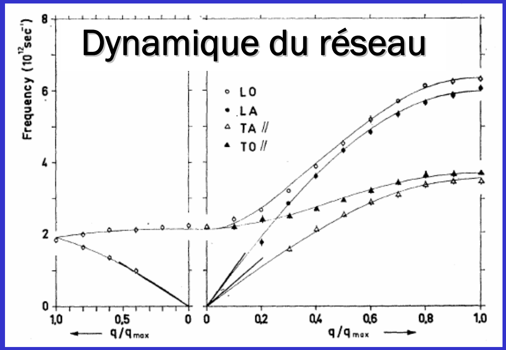


PHYSIQUE DU SOLIDE ET TECHNOLOGIE

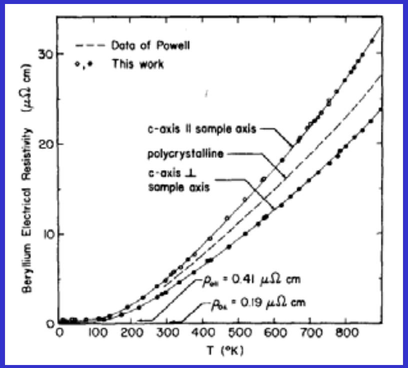
Structure cristalline



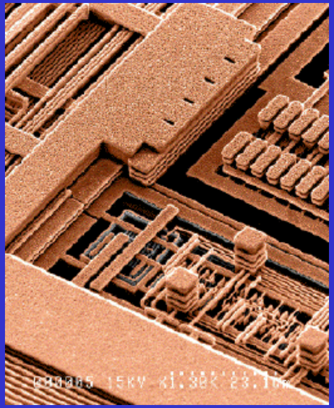




Propriétés macroscopiques
(transport, magnétiques, ...)



Propriétés fonctionnelles
(dispositifs et systèmes)



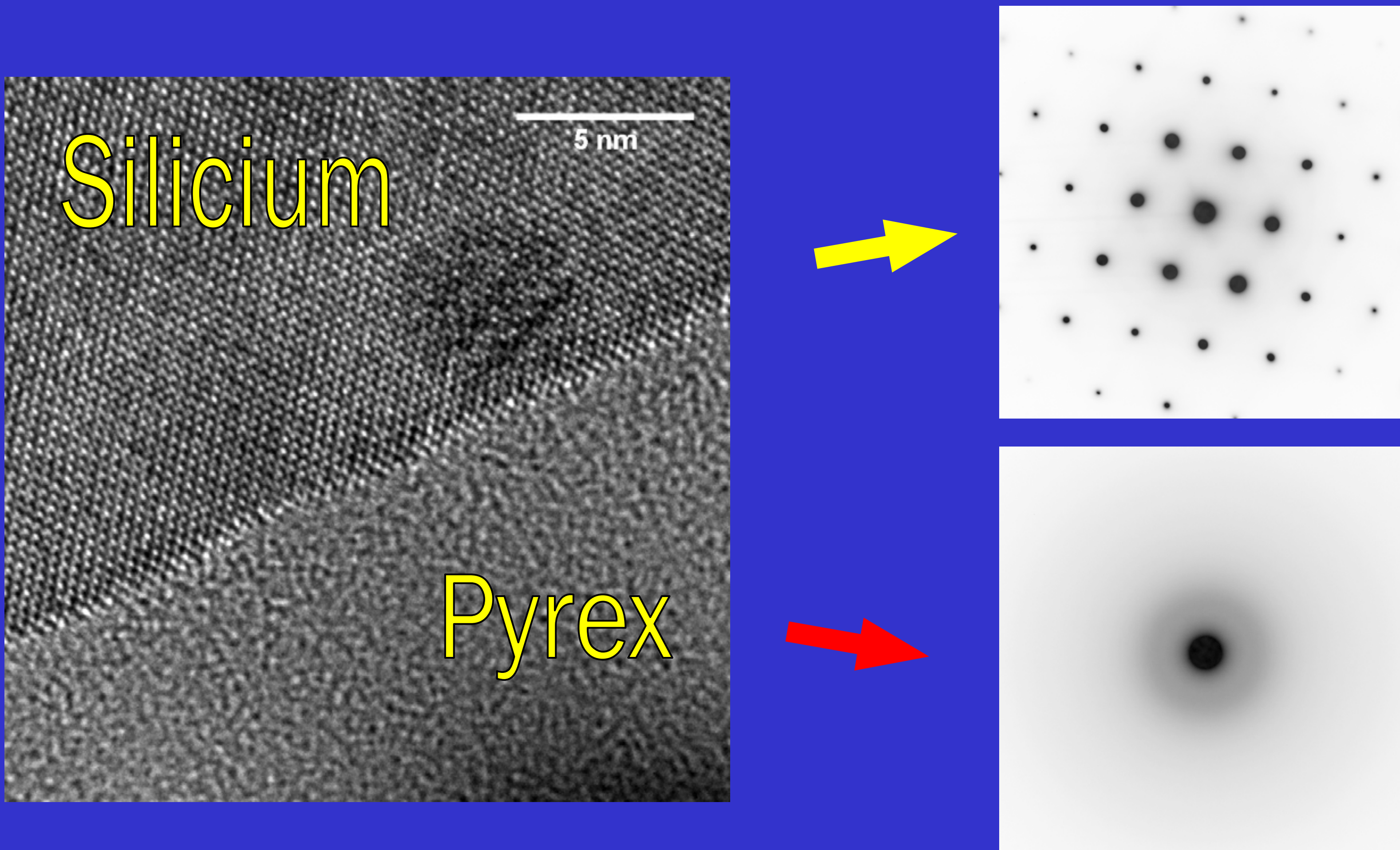
Cours I.1. Électron dans un potentiel périodique

- Classification de la matière dans l'état condensée : liquides et solides ; solides amorphes et solides cristallins.
- Symétrie de translation. Maille élémentaire et maille primitive d'un réseau cristallin.
- Electrons dans un potentiel périodique. Approximation de l'électron indépendant : la notion de gaz d'électrons. Limites de validité.
- Le théorème de Bloch. La quasi-quantité de mouvement, **k**, et la relation de dispersion ε_k.
- Réseaux et vecteurs réciproques. Cas 1D. Zones de Brillouin.
- Les approximations de l'électron quasi-libre et des liaisons fortes.
- La relation de dispersion ε_k dans l'approximation des électrons quasi-libres.

COURS I

1. Electrons dans un potentiel périodique
2. Théorème de Bloch
3. Quasi-quantité de mouvement
4. Relation de dispersion

SOLIDES CRISTALLINS ET AMORPHES:
LES RECONNAITRE GRACE A LA MICROSCOPIE ELECTRONIQUE



Rappel: la fonction d'onde de l'électron libre

L'eq. de Schrödinger pour l'électron libre (U=cte) :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+U\psi=\varepsilon\psi$$

La solution est une onde plane de vecteur d'onde k :

$$\psi_k(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}\exp(ikx)$$

La relation entre k et l'énergie ε est :

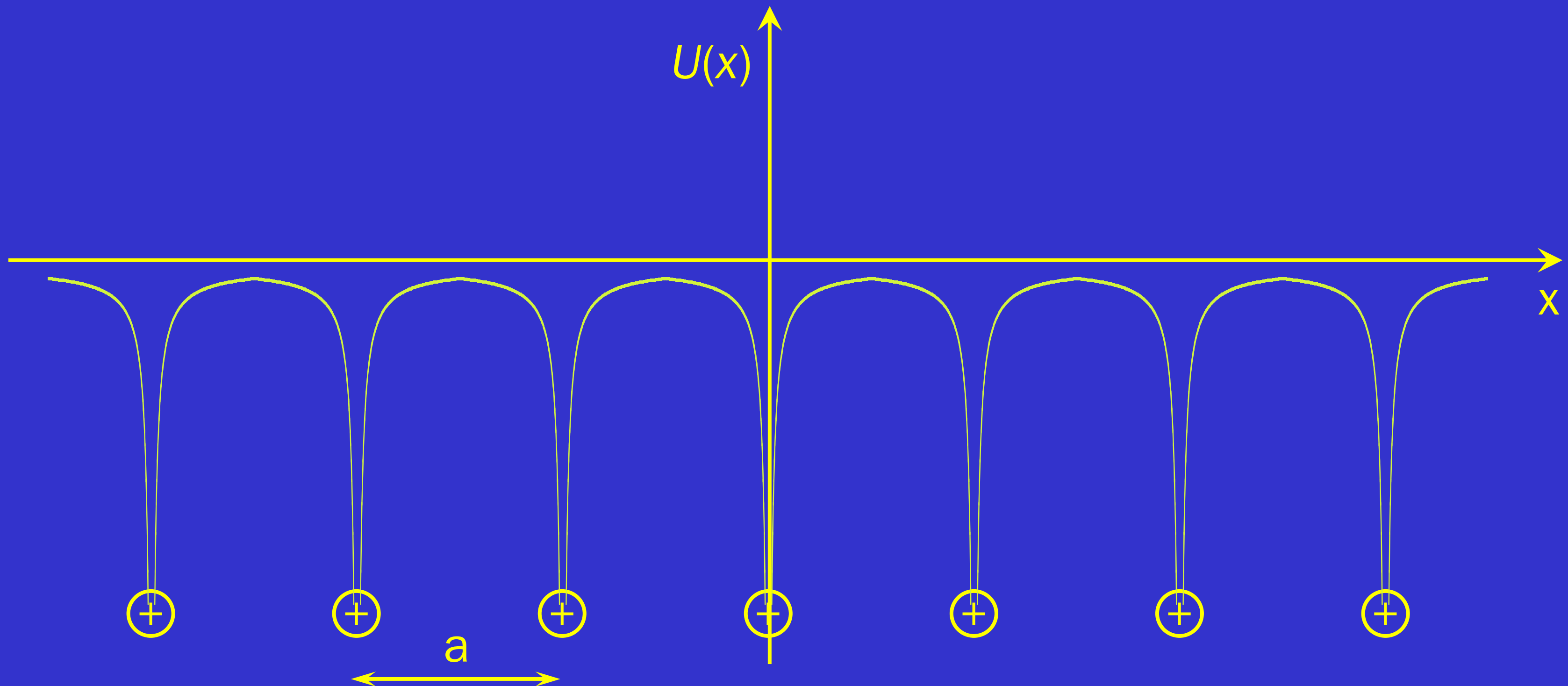
$$\varepsilon_k=\frac{\hbar^2k^2}{2m}+U$$

Cette relation est appelée « relation de dispersion »

A noter le coefficient de normalisation $1/\sqrt{L}$ qui tient compte du confinement de l'électron dans un segment de longueur L.

Le terme constant U n'est pas essentiel, puisqu'il définit tout simplement le zéro de l'énergie.

Electron dans un potentiel périodique



$Q = Z\,e$

N+1 ions : $$U(x) = \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{n=-N/2}^{N/2}\frac{1}{|x-na|} = \sum_{-\infty}^{+\infty} U_\ell \, \mathrm{e}^{2\pi i \ell \frac{x}{a}}$$

Longueur du cristal : $L = Na$

États électroniques dans un potentiel périodique: théorème de Bloch

Question : comment ψ(x) et ε vont-ils changer quand $U(x)$ est périodique?

Le théorème de Bloch fournit une réponse quant à la forme générale de ψ(x):

$$\psi_k(x) = u_k(x)\exp(ikx)$$

Ceci est la “fonction de Bloch”

où la fonction u_k(x) est périodique:

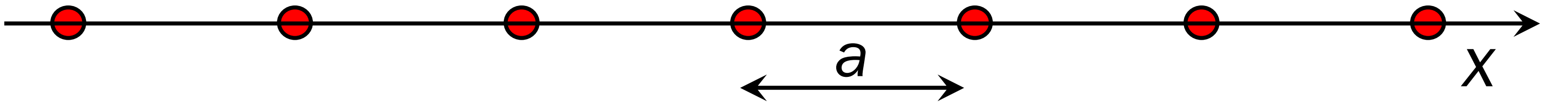
$$u_k(x) = u_k(x+a) = \sum_m u_{k,m} \exp\left(2\pi i m \frac{x}{a}\right) = \sum_m u_{k,m} \exp(i g_m x)$$

Les vecteurs g_m sont appeles « vecteurs reciproques » du réseau:

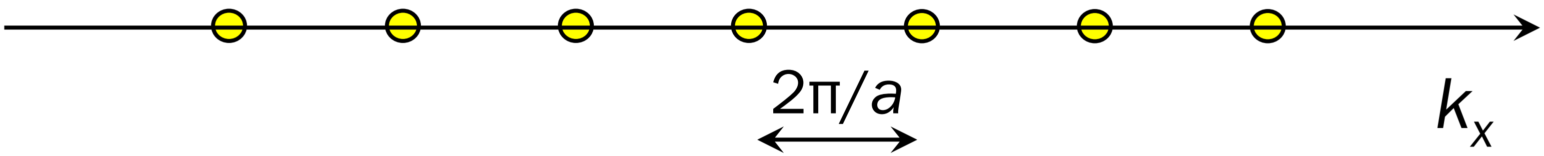
$$g_m = \frac{2\pi m}{a}$$

Relation entre réseau direct et réseau réciproque

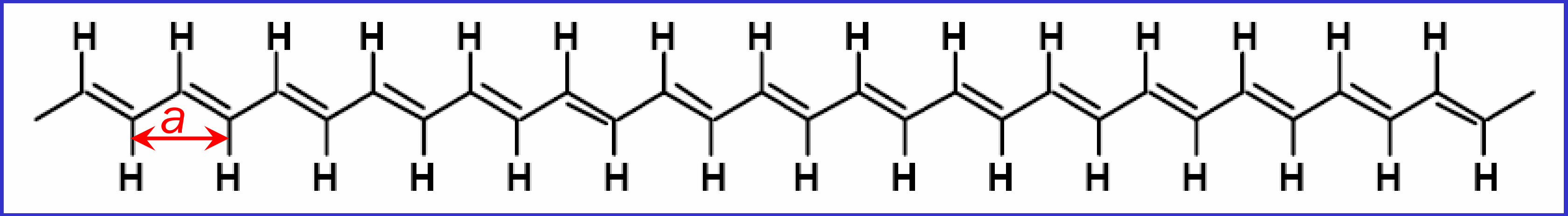
Espace réel (direct)



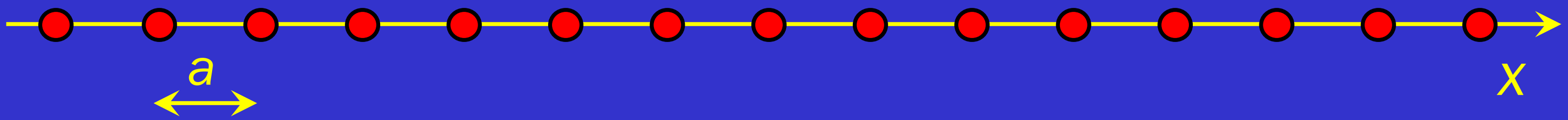
Espace réciproque (des vecteurs d'onde)

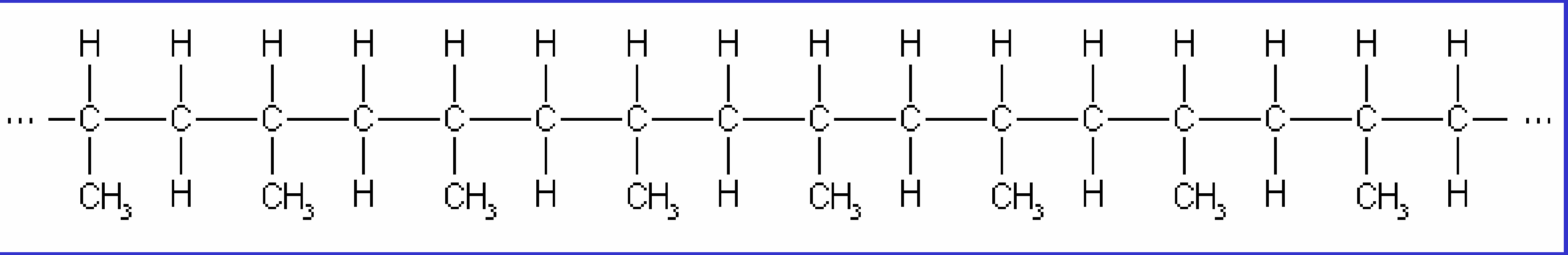


STRUCTURES PERIODIQUES EN 1D

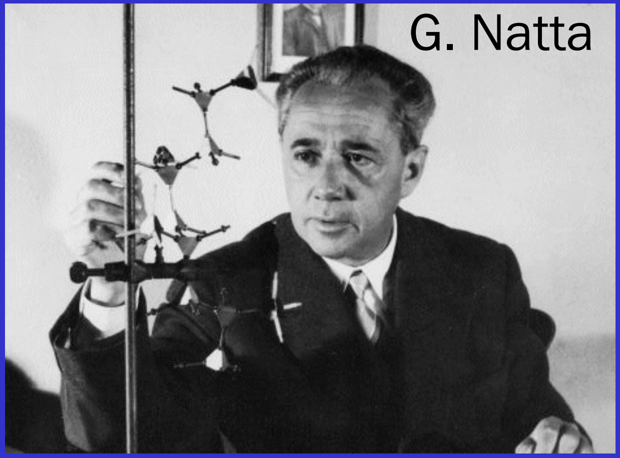


Chaîne de polyacétylène





Polypropylène



Comment calculer $\psi_k(x)$ et ε_k?

L'équation de Schrödinger

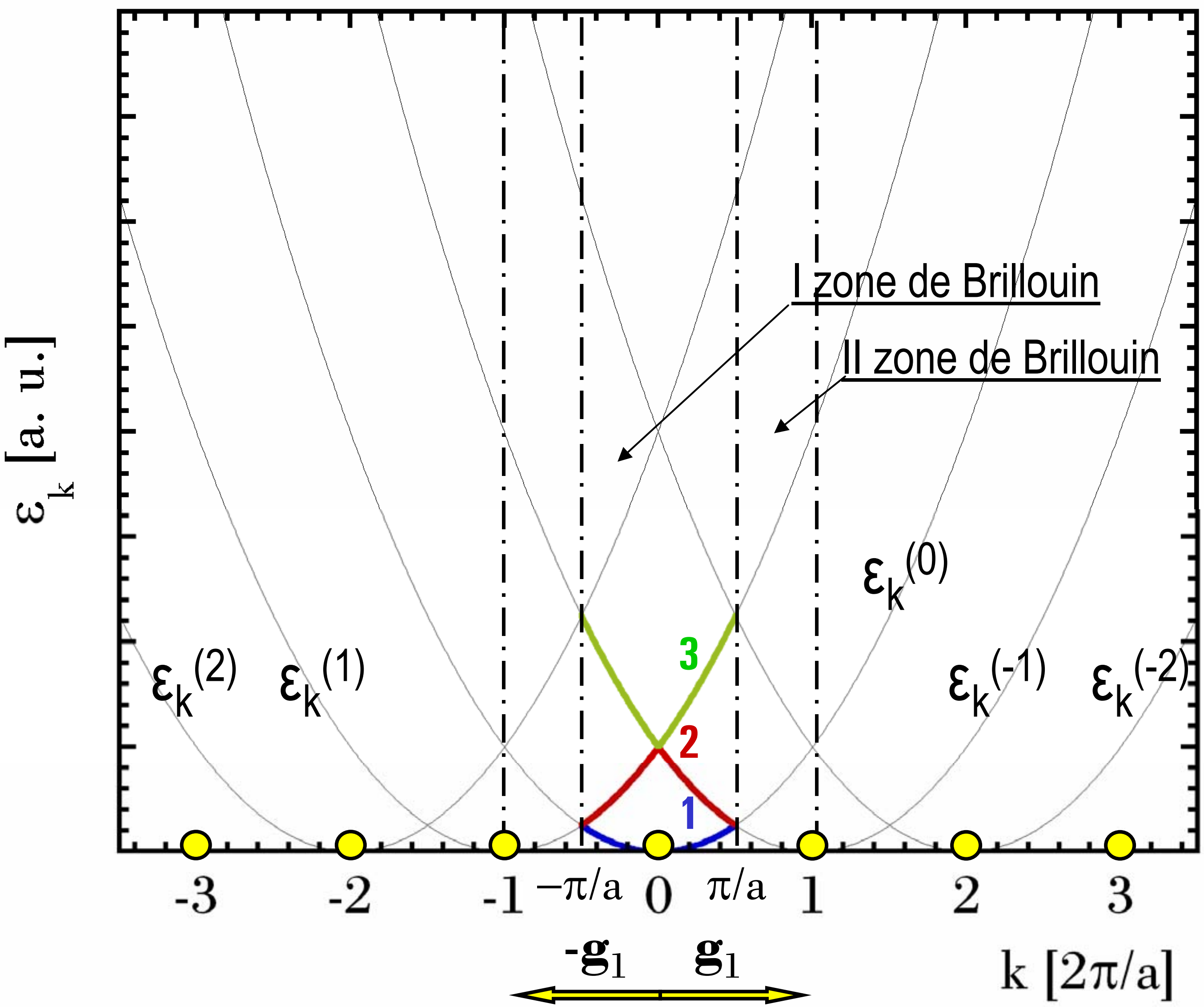
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_k}{dx^2}+U(x)\psi_k=\varepsilon\psi_k$$

conduit a l'équation séculaire suivante pour les coefficients $u_{k,\ell}$ de la fonction de Bloch:

$$\left(\varepsilon_k-\varepsilon_k^{(\ell)}\right)u_{k,\ell}-\sum_{m+n=\ell}u_{k,m}U_n=0$$

Ou: $$\varepsilon_k^{(\ell)}=\frac{\hbar^2\left(k+g_\ell\right)^2}{2m}$$

Les fonctions $\varepsilon_k^{(\ell)}$ représentent la relation de dispersion pour un électron libre dans un potentiel périodique d'intensité négligeable



MP024-Gauzzi

Détermination de ε_k

L'équation séculaire précédente est résolue en calculant les valeurs propres du déterminant suivant:

$$\begin{vmatrix} \cdots & & & & & \\ \cdots & \varepsilon_k - \varepsilon_k^{(-1)} & -U_{-1} & -U_0 & \cdots & \\ \cdots & -U_1 & \varepsilon_k - \varepsilon_k^{(0)} & -U_{-1} & \cdots & \\ \cdots & -U_2 & -U_1 & \varepsilon_k - \varepsilon_k^{(1)} & \cdots & \\ \cdots & -U_3 & -U_2 & -U_1 & \varepsilon_k - \varepsilon_k^{(2)} & \\ & & & & & \cdots \end{vmatrix} = 0$$